

IB 131-2015/046

**Potenzialbasiertes Modellieren
selbstorganisierter Prozesse**

Julian Redlich



**Institut für Faserverbundleichtbau und Adaptronik
Braunschweig**

August 2015

Deutsches Zentrum
für Luft- und Raumfahrt e.V.
in der Helmholtzgemeinschaft
Institut für Faserverbundleichtbau und Adaptronik


IB 131-2015/046

**Potenzialbasiertes Modellieren
selbstorganisierter Prozesse**

Braunschweig, August, 2015

Der Bericht umfasst:

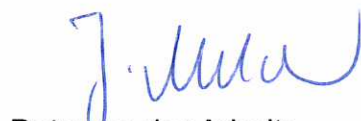
147 Seiten



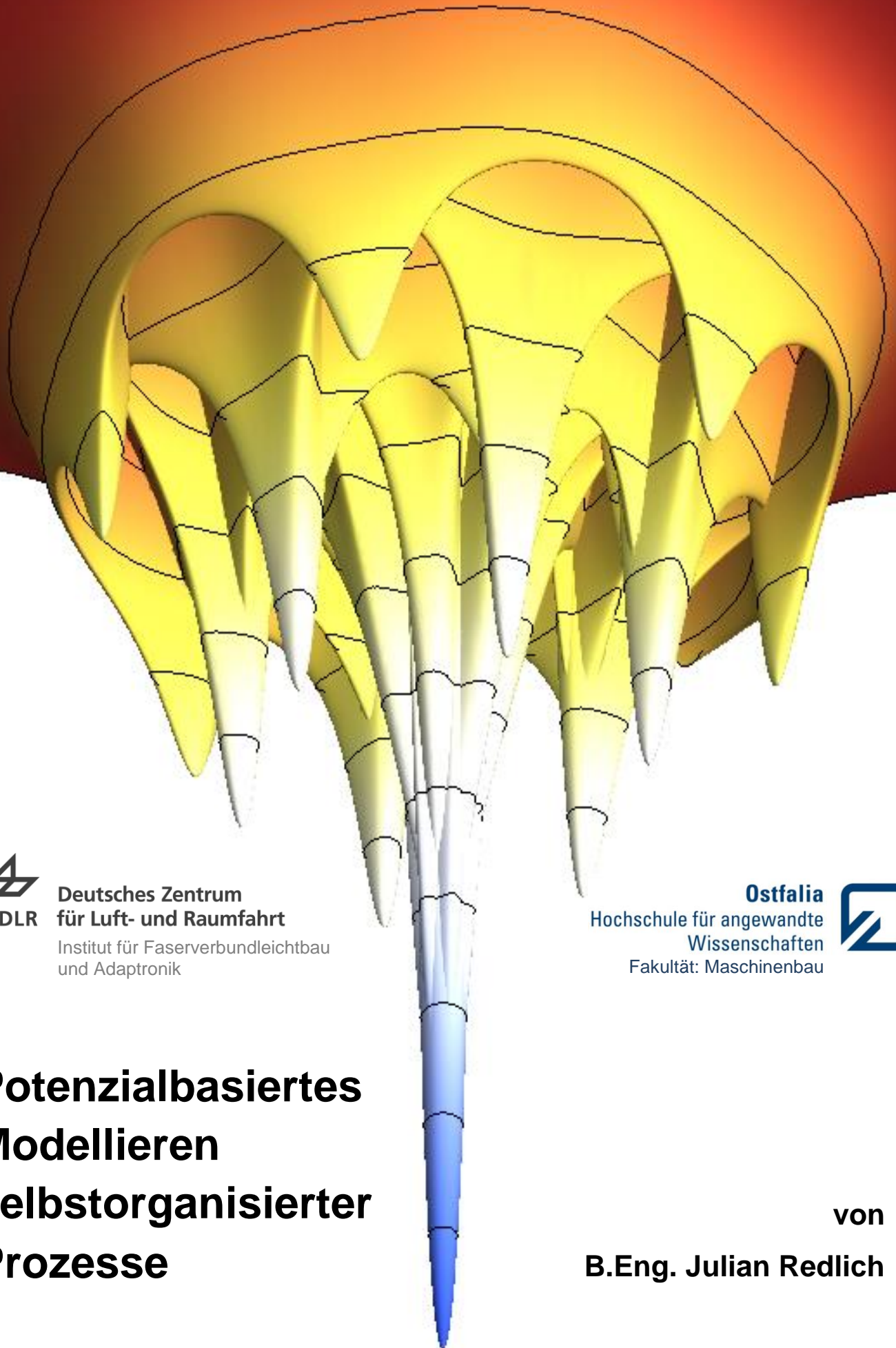
Institutsleiter:
Prof. Dr.-Ing. M. Wiedemann



Verfasser:
Julian Redlich



Betreuer der Arbeit:
Prof. Dr. J. Melcher



DLR

Deutsches Zentrum
für Luft- und Raumfahrt

Institut für Faserverbundleichtbau
und Adaptronik

Ostfalia

Hochschule für angewandte
Wissenschaften
Fakultät: Maschinenbau



Potenzialbasiertes Modellieren selbstorganisierter Prozesse

von
B.Eng. Julian Redlich

III. Inhaltsverzeichnis

1	EINLEITUNG	15
2	GRUNDLAGEN DES POTENZIALBASIERTEN MODELLIERENS.....	17
2.1	ZUM BEGRIFF UND WESEN DER ENERGIE.....	17
2.2	DER FEINE UNTERSCHIED ZWISCHEN DER POTENZIELLEN ENERGIE UND DEM POTENZIAL	29
2.3	SELBSTORGANISIERTE PHYSIKALISCHE SYSTEME	30
2.4	ELEKTRISCHE POTENZIALE UND FELDER	35
2.4.1	<i>Zum Feldbegriff.....</i>	<i>36</i>
2.4.2	<i>Zur elektrischen Ladung und zum Coulomb-Gesetz</i>	<i>37</i>
2.4.3	<i>Zu elektrischen Feldern</i>	<i>43</i>
2.4.4	<i>Zum Coulomb-Potenzial.....</i>	<i>44</i>
2.4.5	<i>Zum Zusammenhang von dem Potenzial und der Feldstärke</i>	<i>49</i>
2.5	MECHANISCHE POTENZIALE	50
2.5.1	<i>Zum Gravitationspotenzial</i>	<i>50</i>
2.5.2	<i>Grundsätzliches zum harmonischen Potenzial.....</i>	<i>52</i>
2.5.3	<i>Berechnung von Systemzuständen und Prozessabläufen im harmonischen Potenzial mit Hilfe des Lagrange'schen Formalismus</i>	<i>56</i>
2.6	POTENZIALE VON ATOMBINDUNGEN	62
2.6.1	<i>Zum Lennard-Jones-Potenzial.....</i>	<i>62</i>
2.6.2	<i>Eigenschaften des Lennard-Jones-Potenzials</i>	<i>67</i>
3	POTENZIALBASIERTE MODELLIERUNG SELBSTORGANISierter PROZESSE	71
3.1	SIMULATION POTENZIALBASIERTER SYSTEME	71
3.1.1	<i>Simulationsalgorithmen für das Lennard-Jones-Potenzial</i>	<i>72</i>
3.2	ERGEBNISSE DES POTENZIALBASIERTEN MODELLIERENS UND DEREN VISUELLE INTERPRETATION	80
4	POTENZIALBASIERTE MODELLIERUNG AUSGEWÄHLTER SYSTEME.....	87
4.1	SIMULATIONSBEISPIELE FÜR SYSTEME MIT DEM HARMONISCHEN POTENZIAL	87
4.1.1	<i>Feder-Masse-Systeme mit Schraubenfedern</i>	<i>87</i>
4.1.2	<i>Feder-Masse-Systeme mit zwei Schraubenfedern</i>	<i>91</i>
4.1.3	<i>Feder-Masse-Systeme mit drei Schraubenfedern</i>	<i>96</i>
4.2	SIMULATIONSBEISPIELE FÜR VIELTEILCHENSYSTEME MIT LENNARD-JONES-POTENZIALEN.....	98
4.2.1	<i>Beeinflussung des Bindungsabstandes durch die Überlagerung von Potenzialen</i>	<i>99</i>
4.2.2	<i>Kräfte und Reißlänge einer Teilchenkette im gravitationsfreien Raum</i>	<i>101</i>
4.2.3	<i>Selbstorganisiertes Verhalten einer Teilchenkette im 2D-Raum.....</i>	<i>105</i>
4.2.4	<i>Teilchenkette im Gravitationsfeld.....</i>	<i>109</i>
4.2.5	<i>Selbstorganisierte Entstehung von Mustern und Clustern in Vielteilchensystemen</i>	<i>112</i>

4.2.6	<i>Simulation symmetrischer Vielteilchensysteme</i>	122
4.2.7	<i>Selbstorganisiertes Schrumpfungsverhalten von Vielteilchensystemen</i>	127
4.2.8	<i>Selbstorganisiertes Verhalten von Vielteilchensystemen bei äußerer Belastung</i>	129
5	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	133
6	ABBILDUNGSVERZEICHNIS	137
7	LITERATURVERZEICHNIS	145
8	ANHANG	147
A.	Programmoberfläche.....	147

IV. Symbolverzeichnis

Lateinische Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
A	Positionsmatrix der Teilchen eines Systems	m
a	Beschleunigung	m/s
\vec{B}	Magnetische Flussdichte	Vs/m^2
\vec{B}_0	Vakuum Flussdichte	Vs/m^2
c_0	Lichtgeschwindigkeit im Vakuum: ($c_0 = 299792458 \text{ m/s}$)	m/s
d	Dämpfungskonstante	$N \cdot s/m$
\vec{D}	Elektrische Verschiebungsdichte	C/m^2
\vec{e}	Einheitsvektor	
e	Elementarladung	C
\vec{E}	Elektrische Feldstärke	N/C
E	Energie	J
E_{dis}	Dissipative Energie	J
E_{ges}	Gesamtenergie	J
E_{kin}	Kinetische Energie	J
E_{pot}	Potenzielle Energie	J
f_0	Eigenfrequenz	Hz
f	Frequenz	Hz
F	Kraft	N
F_d	Dämpfungskraft	N
F_k	Federkraft	N
F_m	Trägheitskraft einer Masse	N

g	Erdbeschleunigung (nahe der Erdoberfläche: $g = 9,81 \text{ m/s}$)	m/s^2
G	Freie Enthalpie	J
G	Gravitationskonstante ($G = 6.67428 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3/\text{kg s}^2$)	Nm^2/kg^2
h	Höhe	m
Δh	Höhenunterschied	m
H	Enthalpie	J
\vec{H}	Magnetische Feldstärke	A/m
\vec{J}	Magnetische Polarisation	$T = \text{Vs/m}^2$
k	Federsteifigkeit	N/m
k_b	Boltzmann-Konstante ($k_b = 1,380658 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$)	J/K
l_0	Länge einer Feder im entspannten Zustand	m
m	Masse (fett gedruckt)	kg
\mathbf{m}	Exponent des anziehenden Terms des Lennard-Jones-Potenzials	
M	Masse von der das Potenzial ausgeht	kg
N	Anzahl der Teilchen	
\mathbf{n}	Exponent des abstoßenden Terms des Lennard-Jones-Potenzials	
p	Druck	N/m^2
P	Leistung	$W = \text{J/s}$
Q	Punktladungen	C
Q	Wärme	J
ΔQ	Änderung der Wärme	J
R	Radius der Erde	m
r	Abstand zwischen Teilchen	m
\vec{r}	Allgemeiner Raumvektor	m

r_w	Wendepunkt im Lennard-Jones-Potenzial	m
r_w	Reißlänge im Lennard-Jones-Potenzial	m
\vec{r}_0	Ortsvektor	m
r_0	Bindungsabstand im Lennard-Jones-Potenzial	m
r_{12}	Abstand zwischen zwei Ortsvektoren \vec{r}_1 und \vec{r}_2	m
s	Strecke, Weg	m
Δs	Weglänge	m
ΔS	Änderung der Entropie	J/K
S	Entropie	J/K
T	Temperatur	K
t	Zeit	s
U	Innere Energie	J
U_0	Bindungsenergie bei r_0 im Lennard-Jones-Potenzial	J
ΔU	Änderung der inneren Energie	J
$U(\vec{r})$	Allgemeines ortsabhängiges Potenzial	
v	Geschwindigkeit	m/s
V	Volumen	m
$V(\vec{r})$	Ortabhängige potenzielle Energie	J
W	Technische Arbeit	$N \cdot m$
x	x-Achse	m
Δx	Streckenänderung	m
x_0	Anfangsauslenkung eines Systems	m
y	y-Achse	m
z	z-Achse	m

Griechische Symbole

Symbol	Bedeutung	Einheit
α	stoffspezifische Eigenschaften Lennard-Jones Potenzial	J/C
β	stoffspezifische Eigenschaften des Lennard-Jones Potenzial	J/m
ε_0	Elektrische Feldkonstante	As/Vm
μ	Magnetische Permeabilität	Vs/Am
μ_0	Magnetische Feldkonstante	Vs/Am
π	Kreiszahl (3.14159265359)	
φ_A	elektrische Potenzial am Punkt A	V
φ_P	Elektrisches Potenzial am Punkt P	V
$\phi(\vec{r})$	Gravitationspotenzial	J/kg
χ_m	Magnetische Suszeptibilität	
ω_0	Eigenkreisfrequenz	rad/s

*Was keiner wagt, das sollt ihr wagen,
Was keiner sagt, das sagt heraus,
Was keiner denkt, sollt ihr befragen,
Was keiner anfängt, das führt aus.*

*Wenn keiner JA sagt, sollt ihr's sagen,
Wenn keiner NEIN sagt, sagt doch NEIN,
Wenn alle zweifeln, wagt zu glauben,
Wenn alle mittun, steht allein!*

*Wo alle loben, habt Bedenken,
Wo alle spotten, spottet nicht,
Wo alle geizen, wagt zu schenken,
Wo alles dunkel ist, macht Licht!*

(Lothar Zenetti)

1 Einleitung

Der eine sieht nur Bäume, Probleme dicht an dicht.

Der andre Zwischenräume und das Licht.

(unbekannt)

In einem neuen Forschungsfeld des CAMPUS Funktionswerkstoffe und -strukturen, einer Forschungs Kooperation der TU Clausthal, mit dem DLR Braunschweig und der BAM Berlin, sollen die Möglichkeit einer potenzialbasierten Modellierung selbstorganisierter Systeme untersucht werden. Die Absicht ist, *durch gezielte Manipulation ausgewählter Systempotenziale selbstorganisierte Prozesse auszulösen, deren Ergebnisse regelmäßige und stabile Topologie ergeben.*

Während in der Kristallographie und in der Nanotechnologie **selbstorganisierte Fertigungsverfahren** bereits etabliert sind, wie z.B. die epitaktische Strukturierung oder die Elektrophorese, kommen selbstorganisierte Fertigungsverfahren im Meso- und Makroskopischen nur vereinzelt zum Einsatz. Es zeigt sich, dass Materialien und Werkstoffe, die bei solchen Verfahren entstehen, meist außergewöhnliche Charakteristika aufweisen. Diese betreffen sowohl elektrische, optische wie auch mechanische Eigenschaften. Sie wirken nicht nur im Nanobereich, sondern beeinflussen die Systeme auch auf der makroskopischen Ebene. Es ist vorstellbar, dass herkömmliche Produktionsverfahren durch potenzialgesteuerte selbstorganisierte Fertigungsprozesse zukünftig ergänzt oder gar ersetzt werden. So könnte bei der Herstellung von Faserverbundstrukturen eine selbstorganisierte Faserausrichtung die Steifigkeiten der Bauteile verbessern und gleichzeitig den Materialeinsatz verringern. Des Weiteren sind dreidimensionale hexagonale Wabenstrukturen, die eine perfekte Geometrie aufweisen, als Aktuatoren oder auch als Kernmaterial, z.B. in Rotorblättern, als perfekte Leichtbaustrukturen denkbar [Melcher, 2004]. Die Potenziale für die Steuerung der Formbildungsprozesse sind unter anderem:

- elektrische Potenziale
- thermische Potenziale
- Gravitationspotenzial
- Bindungspotenziale von Atomen
- magnetische Potenziale
- optische Potenziale
- mechanische Potenziale

Die vorliegende Masterarbeit befasst sich mit den theoretischen Grundlagen des **potenzialbasierten Modellierens selbstorganisierter Systeme**. Es werden zunächst einige grundlegende Begriffe wie Potenzial, Energie oder auch Selbstorganisation erläutert. Anhand computergestützter Simulationen können fundamentale Charakteristika bei selbstorganisierten Prozessen vorhergesagt werden. Die Simulationen basieren auf dem Lennard-Jones-Potenzial, welches näherungsweise die Bindungsenergie bestimmter chemischer Atombindungen beschreibt, und auf dem harmonischen Potenzial. Die Ergebnisse der Simulationen weisen häufig hexagonale Gitterstrukturen auf. Eigentlich kein Wunder, denn sie sind auch in der Natur häufig zu finden. Sie besitzen eine hohe Stabilität, da jegliche Kräfte durch 120°-Winkel optimal weitergeleitet werden. Durch die gezielte Manipulationen von Systempotenzialen sind signifikante Veränderungen bei Strukturbildungsprozessen in den Simulationen zu erkennen. Diese Mechanismen gilt es zu verstehen und in geeigneter Weise anzuwenden.

Selbstorganisierte Fertigungsverfahren könnten in Zukunft völlig neue Strategien für die technische Gestaltung von Produkten liefern und so die Fertigung von Hochleistungsstrukturen erheblich verbessern [Melcher, 2004]

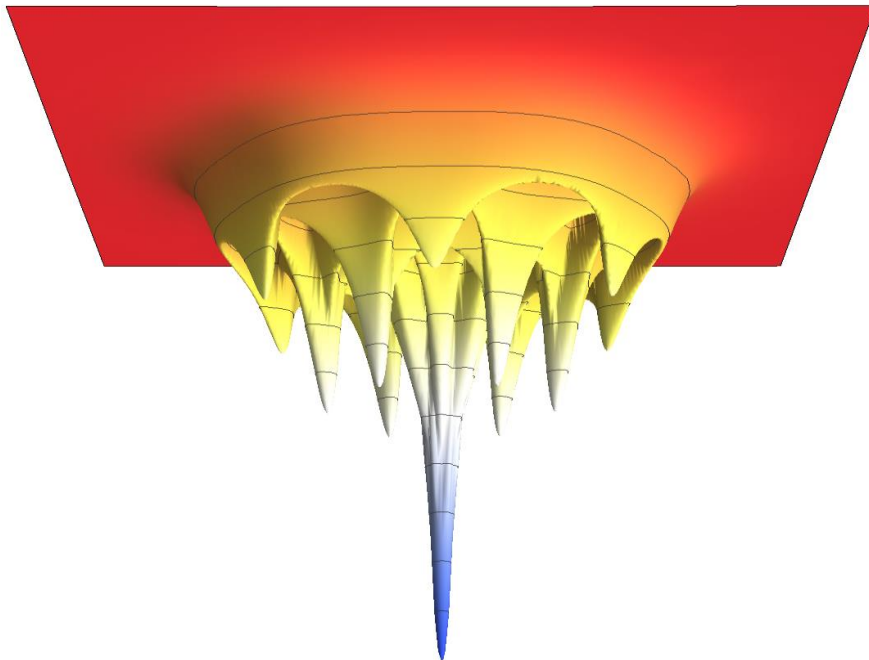


Abbildung 1.1: 3D-Potenzial einer hexagonalen Einheitszelle (seitliche Betrachtung). Die Erläuterung erfolgt in der vorliegenden Arbeit.

2 Grundlagen des potenzialbasierten Modellierens

*Leicht beieinander wohnen die Gedanken,
doch hart im Raum stoßen sich die Sachen.
(Friedrich Schiller)*

Das *potenzialbasierte Modellieren selbstorganisierter Prozesse* stellt ein Verfahren zur kontrollierten Beeinflussung von Prozessen dar. Das Endprodukt soll im Wesentlichen durch die gezielte Manipulation von Systempotenzialen gesteuert werden. Da Potenziale den Zustandsraum eines Systems durch die Energieverteilung im Raum beschreiben, ist das potenzialbasierte Modellieren als energetisches Verfahren einzustufen. In den Grundlagen werden daher Begriffe wie Energie, Selbstorganisation und Potenzial sowie die mathematischen Grundlagen von skalaren Feldern und Vektorfeldern behandelt.

2.1 Zum Begriff und Wesen der Energie

Die Energie ist in der Physik eine abstrakte Rechengröße [Feynman, 2001]. Sie ist eine Erhaltungsgröße, kann also weder vernichtet noch erzeugt werden. Sie ist bei allen Veränderungen und Abläufen, die wir beobachten können, beteiligt. Sie bildet ganz allgemein gesagt die physikalische Grundlage unseres Universums. Das Formelzeichen für die Energie ist E und hat die Einheit *Joule*. Um zwischen unterschiedlichen Energieformen unterscheiden zu können, werden häufig unterschiedliche Symbole verwendet.

Die Energie tritt in vielen verschiedenen Formen in Erscheinung. Diese sind unter anderem

- Gravitationsenergie,
- kinetische Energie,
- thermische Energie,
- elastische Energie,
- chemische Energie,
- Strahlungsenergie,
- Kernenergie und Massenenergie [Feynman, 2001].

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit sind von besonderer Bedeutung:

- die **potenzielle Energie** E_{pot} ,
- die **kinetische Energie** E_{kin}
- sowie die **dissipative Energie** E_{dis} .

Außerdem sei noch die **technische Arbeit** W genannt. Sie ist die Energie, welche durch die Wirkung einer Kraft an einem System verrichtet wird. Sie gibt an, wieviel Energie einem System durch einen mechanischen Vorgang zugeführt oder abgeführt wird [Halliday, 2013].

Sobald Energie (als Arbeit) auf ein System oder von einem System übertragen wird, ändert sich die **innere Energie** U des Systems. Daher lässt sich aus der Betrachtung des totalen Differenzials dU der inneren Energie die Zustandsgleichungen des Systems ermitteln. Unter der inneren Energie eines Systems versteht man den thermischen Mittelwert der Energie aller einzelnen Systemkomponenten. Ihre Änderung ist die Summe aus der Wärme Q , die dem System zugeführt wird, und der Arbeit W die an dem System verrichtet wird:

$$\Delta U = Q + W. \quad (2.1)$$

Mit Hilfe der Legendre-Transformation lassen sich alle anderen energetischen Größen herleiten, die in der Thermodynamik gebräuchlich sind. So ist beispielsweise die Enthalpie H (das ist der Wärmehalt eines Systems mit $H = U + p \cdot V$) die Legendre-Transformierte nach dem Volumen V bei gegebenen Druck p . Ein weiteres Beispiel ist die **freie Energie** F (auch Helmholtz-Energie bzw. -Potenzial genannt als $F = U - T \cdot S$), unter der man die für ein thermisches Gleichgewicht mit der Umgebung notwendigen Energie versteht. Sie ist die Legendre-Transformierte der inneren Energie U nach der **Entropie** S bei gegebener Temperatur T . Die Entropie S versteht man in der Thermodynamik als

$$S = k_B \cdot \log \Omega, \quad (2.2)$$

das Produkt aus der Boltzmann-Konstanten k_B und dem logarithmischen **Phasenraum** Ω , der alle möglichen Zustände eines Systems erfasst. Sie gilt auch als Maß

der Unordnung, die bei selbstorganisierten Prozessen stets zunimmt. Ihre Änderung beim Übergang des Systems aus einem Zustand in einen anderen erfolgt gemäß

$$dS = \frac{dQ}{T} + \frac{\delta W_{dis}}{T}. \quad (2.3)$$

Es ist somit klar, dass sich selbstorganisierte Prozesse auch mit Hilfe der **Entropie** beschreiben bzw. modellieren lassen. In der vorliegenden Arbeit wird jedoch das Potenzial aus Gründen der Anschaulichkeit bevorzugt. Würde man die Legendre-Transformation von der **Enthalpie** H nach der **Entropie** S berechnen, erhöht man die **freie Enthalpie** G , auch **Gibbs-Energie** bzw. **–Potenzial** genannt. Sie ist der Anteil von H , der in jede beliebige Energieform umwandelbar ist. Für sie gilt:

$$G = H - T \cdot S = F + p \cdot V. \quad (2.4)$$

Die Energie kann also zwischen den unterschiedlichen Erscheinungsformen umgewandelt werden. Es ist jedoch nicht möglich, dass die Energie beliebig von der einen in die andere Form umgewandelt wird. Die Umwandlung unterliegt klaren Regeln. Dadurch ist es bei einem Prozesses möglich, bei bekannten Randbedingungen und Systempotenzialen abzuschätzen, welchen Endzustand das System annehmen wird. Es ist wichtig zu verstehen, dass jegliche Prozessabläufe mit einer Verschiebung von Energie einhergehen. Die Energie muss dabei nicht immer aus dem System oder in das System fließen. Sie kann auch innerhalb eines Systems umgewandelt werden. Dies erfolgt z.B. dadurch, dass chemische Bindungen gebildet oder aufgebrochen werden. Die meisten Prozesse laufen jedoch durch die Zufuhr oder durch die Abgabe von Energie ab. Die Gesamtbilanz der Energie bleibt bei jeden Vorgang konstant. Es gilt für ein geschlossenes System somit:

$$E_{ges} = \textit{konstant}. \quad (2.5)$$

Auf welche Weise Energien zwischen zwei Energieformen umgewandelt werden, lässt sich gut an einem simplen Schwingungssystem beschreiben. In Abbildung 2.1 ist ein ideales (nicht dissipatives) reversibles Schwingungssystem dargestellt, bestehend aus einer Feder und aus einer Masse. Reversibel und nicht dissipativ bedeuten, dass in dem System keine Reibungskräfte auftreten und somit keine Energie verloren geht.

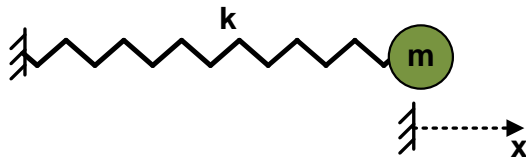


Abbildung 2.1: Harmonisches Schwingungssystem eines Feder-Masse-Systems.

Die Masse und die Feder sind Energiespeicher: die Masse stellt einen Energiespeicher für kinetische Energie dar und die Feder dagegen einen Energiespeicher für die potenzielle Energie. Die gespeicherte Energie in einer Masse berechnet sich bekanntermaßen aus der Masse m und deren Geschwindigkeit v zum Quadrat zu:

$$E_{kin}(v) = \frac{1}{2} \cdot m \cdot v^2. \quad (2.6)$$

Die potenzielle Energie einer linearen Feder berechnet sich aus der Federsteifigkeit k und der quadratischen Auslenkung x aus ihrer Ruhelage gemäß:

$$E_{pot}(x) = \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2. \quad (2.7)$$

Die Federsteifigkeit ist ähnlich der Masse ein Proportionalitätsfaktor, der durch die Federkonstruktion und dem Material bestimmt ist. Je größer die Proportionalitätskonstanten m oder k sind, um so größer ist die Energie, die bei gleicher Geschwindigkeit v bzw. bei gleicher Auslenkung x im System gespeichert ist.

Die potenzielle Energie einer Feder ist in Abbildung 2.2 bezogen auf die Ortskoordinate x dargestellt. Zudem ist das oben aufgeführte Feder-Masse-System in zwei verschiedenen Zuständen eingezeichnet. Die Feder ist an einem Ende bei $x = -0,25 m$ fixiert. Das andere Ende der Feder ist mit der Masse m verbunden und in x -Richtung zusammen mit der Masse frei beweglich. In der Position 1 sind die Feder entspannt und die Geschwindigkeit der Masse null. Das System befindet sich in seiner statischen Ruhelage.

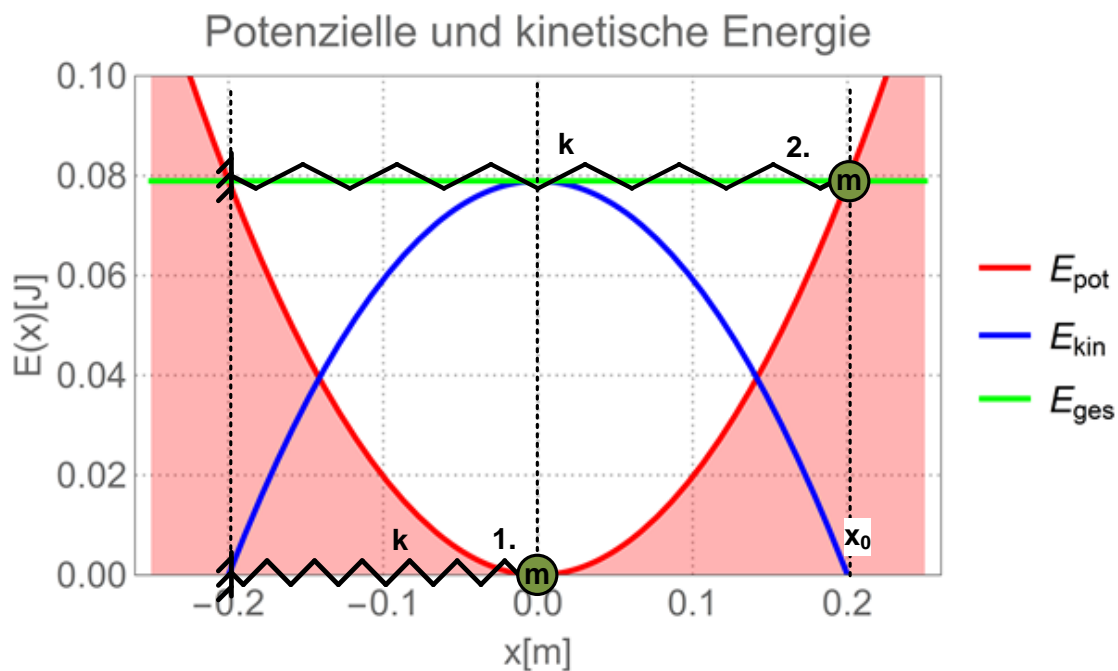


Abbildung 2.2: Energetischer Zusammenhang bei einer Feder in Abhängigkeit von der Auslenkung x . 1.: Die Feder ist entspannt. 2.: Die Feder wird zusammen mit der Masse ausgelenkt. Masse und Feder bilden ein harmonisches reibungsfreies Schwingungssystem.

Wird dem System Arbeit zugeführt, erhöht sich die Energie des Feder-Masse-Systems. Das System befindet sich nun in dem Zustand, der in dem Diagramm mit **2** gekennzeichnet ist. Die Systemenergie ist in der Abbildung 2.2 als grüne Linie gekennzeichnet. Die blaue Kurve gibt die kinetische Energie der Masse bezüglich der Ortskoordinate wieder, die sie bei dem Schwingungsvorgang annimmt. Die Arbeit wird durch eine Auslenkung der Feder dem System zugeführt, die Masse bewegt sich die in positiver x –Richtung. Die Bewegung ist dabei so langsam, ihre Trägheit vernachlässigt werden kann und somit keine kinetische Energie eingebracht wird. Zur Vereinfachung sind die Parameter so festgelegt, dass die Eigenfrequenz f_0 genau 1 Hz beträgt. Die Masse m sei $0,1\text{ kg}$. Die erforderliche Steifigkeit für die Feder berechnet sich demnach aus der Eigenfrequenz f_0 und der Masse m gemäß [Redlich, 2011] zu:

$$k = (2 \cdot \pi \cdot f \cdot \sqrt{m})^2 = 3,94\text{ N/m}. \quad (2.8)$$

Die Masse wird um $x_0 = 0,2\text{ m}$ ausgelenkt. Die dadurch an dem System geleistete Arbeit beträgt nach Gleichung (2.7) $E_{pot} = 0,08\text{ Joule}$.

Solange die Masse festgehalten wird, bleibt das System in Ruhe. Statisch befindet sich das System weiterhin im Gleichgewicht. Alle äußeren Kräfte heben sich gegenseitig auf. Wird das System freigegeben, befindet es sich statisch in einem Ungleichgewicht. Die äußeren Kräfte, die auf die Masse wirken, heben sich nicht mehr gegenseitig auf. Das System befindet sich nun in einem dynamischen Gleichgewicht [Böge, 2014]. Das bedeutet, dass ein Gleichgewicht zwischen der „inneren“ Trägheitskraft F_m der Masse und der äußeren Federkraft F_k herrscht. Dies wird im dritten Newton'schen Gesetz durch das Prinzip „Actio gleich Reactio“ zusammengefasst.

Bei einem freigegeben des System, ändert sich der Zustand ohne ein weiteres Einwirken von außen. Ein derart „spontan“ ausgelöster Prozess läuft nun **selbstorganisiert** ab. Das Ergebnis ist in diesem Fall eine harmonische Schwingung die beliebig lange anhält, da das System reibungsfrei angenommen wurde. Der Bewegungsverlauf des Systems ist in Abbildung 2.3 im linken Diagramm über der Zeit aufgetragen. Im rechten Diagramm der Abbildung 2.3 ist der Kraftverlauf aufgetragen, der zwischen der Masse und der Feder wirkt. Die Kraft, die durch die Feder auf die Masse wirkt, berechnet sich aus der Auslenkung der Feder, welche durch die Position der Masse bestimmt ist. Sie ergibt sich aus dem Hooke'schen Gesetz $F_k = -k x$ bzw. aus dem negativen Gradienten der potenziellen Energie der Gleichung (2.7). Die Trägheitskraft der Masse F_m berechnet sich nach dem Newton'schen Gesetz aus der Masse m und der Beschleunigung a , die aus der zweiten Ableitung der Bewegungsgleichung berechnet werden kann. Im linken Diagramm der Abbildung 2.4 sind der Verlauf der kinetischen Energie in oranger Farbe und der Verlauf der potenziellen Energie blau dargestellt. Die Gesamtenergie des Systems (rote Farbe) ist konstant. Sie ergibt sich aus der Summe aller im System enthaltenen Energien. Die Energie pendelt mit der doppelten Eigenfrequenz des Systems zwischen den beiden Energiereservoirs hin und her. Die kinetische Leistung P_{kin} , die potenzielle Leistung P_{pot} sowie die Gesamtleistung P_{ges} sind im rechten Diagramm der Abbildung 2.4 zu sehen. Die Leistung gibt an, wieviel Energie pro Zeit von der Feder an die Masse übertragen wird und umgekehrt. Eine negative Leistung entspricht einer abgegebenen Leistung. Eine positive Leistung entspricht einer aufgenommenen Leistung. Es gilt:

$$P = \frac{dE}{dt} = \frac{dW}{dt}. \quad (2.9)$$

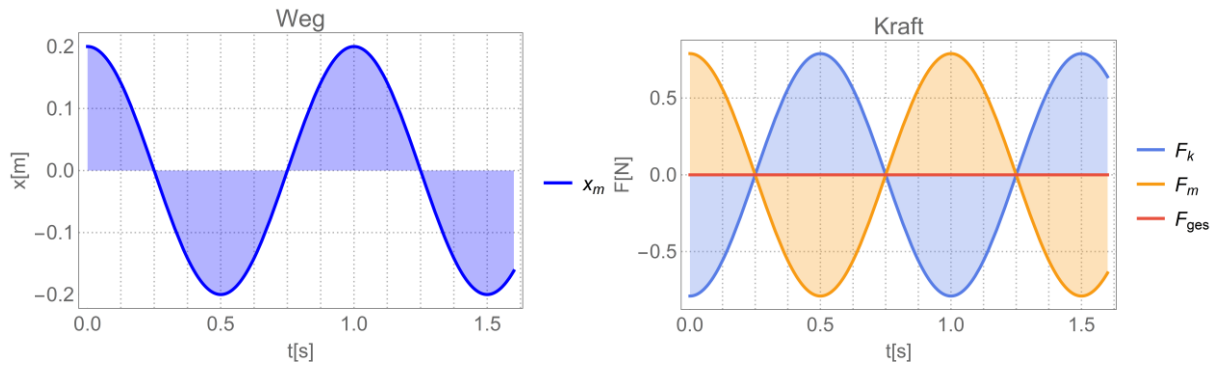


Abbildung 2.3: Auslenkung eines idealen Feder-Masse-Systems: Links ist der Bewegungsverlauf der Masse über der Zeit aufgetragen. Das rechte Diagramm zeigt den Kräfteverlauf zwischen der Feder und der Masse in Form der Federkraft F_k und der Trägheitskraft der Masse F_m .

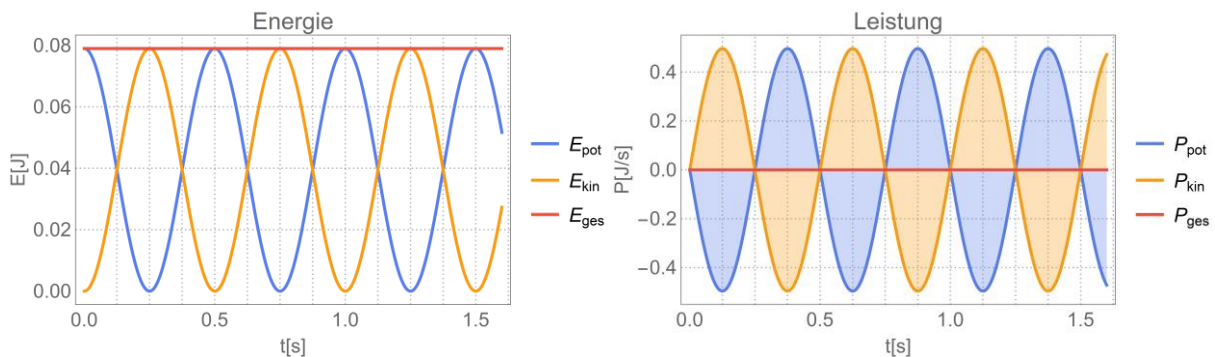


Abbildung 2.4: Energie- und Leistungsverlauf bei einem idealen Feder-Masse-System. Das linke Diagramm zeigt den Verlauf der Energien des Systems. Im rechten Diagramm ist die Leistung über der Zeit aufgetragen.

Zum Anfangszeitpunkt des oben aufgeführten Beispiels ist im Energiediagramm (linkes Diagramm in Abbildung 2.4) die gesamte Energie als potenzielle Energie in der Feder gespeichert. Aus energetischer Betrachtung, besteht zu diesem Zeitpunkt nur die Möglichkeit, dass sich die Energie dorthin bewegt, wo wenig oder keine Energie ist. Es findet ein Ausgleichsvorgang statt. Zum Zeitpunkt $t = 0,125$ s besitzt die Feder und die Masse gleich viel Energie. Da es sich um einen gerichteten Prozess handelt, wird jedoch weiterhin Energie übertragen. Es ist sogar so, dass an dieser Stelle die maximale Leistung erreicht wird: pro Zeiteinheit wird am meisten Energie übertragen. Zum Zeitpunkt $t = 0,25$ s wird die gesamte Energie an die Masse übertragen. Von diesem Moment an wird die Energie wieder an die Feder übertragen. Anschließend läuft der Vorgang rückwärts ab. Nach $t = 1$ s ist eine Schwingungsperiode durchlaufen. Der Vorgang läuft nun vom Ausgangszustand von neuem ab.

Dieses einfache Beispiel zeigt, wie die Energie zwischen zwei Erscheinungsformen umgewandelt werden kann. Die größte Herausforderung bei diesen Gedankenexpe-

riment ist, dass die Übertragung nicht unmittelbar greifbar ist. So abstrakt dieser Vorgang bei einer formellen Untersuchung auch scheinen mag, so können wir doch sehr viel damit anfangen. Durch unsere Erfahrung einen Ball zu fangen, wissen wir intuitiv, was kinetische Energie bedeutet. Auch die potenzielle Energie einer Feder ist durch ihre Kräfte, die wir beim Zusammendrücken spüren, „greifbar“.

Die Abschätzung, wie ein Prozess ablaufen wird, entscheiden wir im Alltag aus der Intuition bzw. aus der Erfahrung heraus. Diese ist meistens richtig, ohne dass wir uns Gedanken über Kräfte, Energien oder Differenzialgleichungen machen. Um neue Strukturen, Prozesse oder Materialsysteme gezielt designen zu können, reicht die Intuition aus dem Alltag jedoch nicht mehr aus. Es ist erforderlich, die Prinzipien, nach denen die Prozesse ablaufen, aus physikalischer Sicht zu verstehen. Das aufgeführte Beispiel zeigt anhand der Modellrechnung mittels Potentials, wie sich Systeme zeitlich entwickeln. Wichtig bei der Betrachtung solcher Systeme ist, dass keine Aussagen über den Verlauf oder über zukünftige Entwicklungen des System gemacht werden können, solange die Anfangsbedingungen nicht bekannt sind. Erst durch weitere Informationen aus einem Zeitpunkt kurz vor t_1 lässt sich durch die zeitliche Entwicklung eine Richtung des Prozesses ableiten. Dabei reicht es nicht aus, nur eine Größe, wie zum Beispiel die Kraft, zu betrachten. Es herrscht immer dann ein Gleichgewicht, wenn die Trägheitskräfte der Massen bei dynamischen Vorgängen berücksichtigt werden. Ist dies der Fall, lässt sich die Prozessrichtung ableiten. Diese beiden Größen, der Weg und die Kraft, bilden zusammen die Energie, welche bei dem Prozess „fließt“:

$$W = \int_{s_1}^{s_2} F \cdot ds. \quad (2.10)$$

Erst durch die gemeinsame Betrachtung von Kraft und Weg wird der Prozessverlauf ersichtlich. Außerdem untermauert diese Betrachtung, warum erst eine Energieübertragung zu einer zeitlichen Änderung eines Systems führt. Solange keine Energieübertragung statt findet, befindet sich ein System im statischen Gleichgewicht.

Der bislang dargestellte Prozess ist reversibel und idealisiert. Ein reales System hingegen besitzt immer eine gewisse Reibung, bei der mechanische Energie in Wärme umgewandelt wird. Die Systemenergie nimmt mit der Zeit ab – der Vorgang ist irre-

versibel. Die durch eine Dämpfung dem System entzogene Energie ist die Dissipationsenergie E_{dis} . Die Schwingungsamplitude der Masse nimmt im Laufe der Zeit ab. Der mechanische Aufbau eines gedämpften Schwingungssystems ist in Abbildung 2.5 zu sehen. Das System besitzt eine viskose Dämpfung mit der Dämpfungskonstanten d . Die Dämpfungskraft F_d sei, wie in vielen Anwendungsfällen, proportional zum Betrag der Geschwindigkeit:

$$F_d = d \cdot v. \quad (2.11)$$

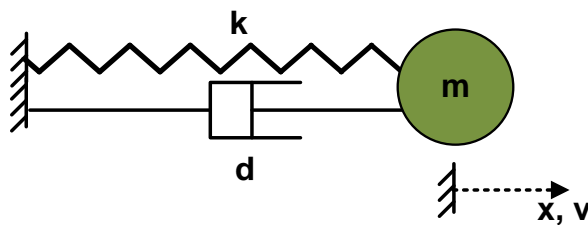


Abbildung 2.5: Aufbau des mechanischen Feder-Masse-Dämpfersystem.

Der zeitliche Verlauf eines gedämpften Schwingungssystems ist in Abbildung 2.6 oben dargestellt. Die Amplitude nimmt erwartungsgemäß exponentiell ab, wobei sich die Periodendauer gegenüber dem gedämpften System um den Faktor $1/\sqrt{1-\beta^2}$ vergrößert, mit $\beta = d/\sqrt{k \cdot m}$ (Lehr'sches Dämpfungsmaß). Dissipationsvorgänge bewirken eine zeitliche Verzögerung.

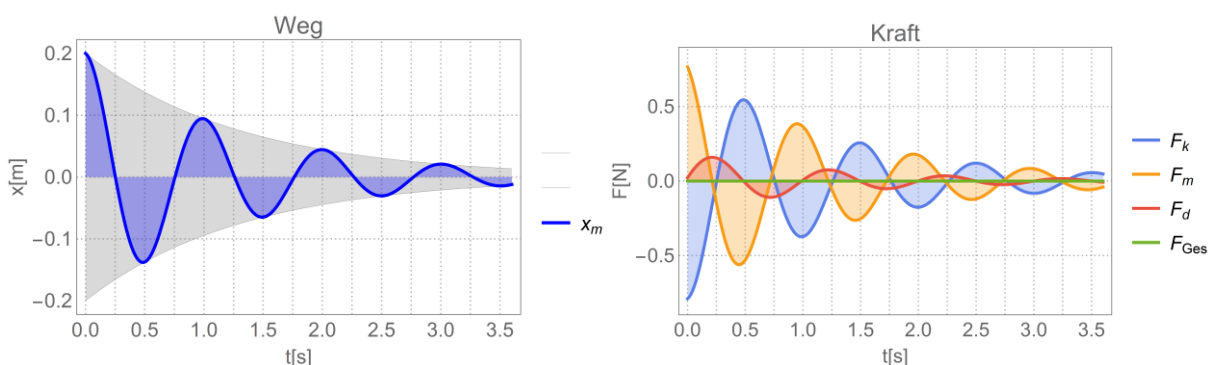


Abbildung 2.6: Gedämpftes Schwingungssystem. Links ist der zeitliche Bewegungsverlauf und rechts der Kraftverlauf über der Zeit dargestellt.

Die Schwingungsenergie, die in Form kinetischer und potenzieller Energie im System gespeichert ist (Abbildung 2.7, in der oberen Graphik die orangefarbene und die blauen Kurve), wird durch die Reibung abgebaut. Diese entzogene Energie wird in

Wärme umgewandelt, welche, vereinfacht betrachtet, einer ungeordneten kinetischen Energie entspricht. In der kinetischen Gastheorie wird die Temperatur als Maß für die mittlere kinetische Energie der Moleküle definiert **[Hering, 1989]**. Die Dissipationsenergie ist in der Abbildung 2.7 (rechte Graphik) mit der roten Kurve dargestellt. Aus einem gerichteten Energiefluss wird ein ungerichteter Energiefluss. Durch die Umwandlung eines gerichteten Schwingungszustands in einen stochastischen, ungerichteten Zustand ist der Prozess irreversibel geworden. Die „entstandene“ Wärme lässt sich nur begrenzt in technische Arbeit, wie Bewegungsenergie oder potenzielle Energie, zurückwandeln. Erst durch den Umstand, dass die Energie im Schwingungssystem dissipiert wird, erhält der Prozess eine orientierte Konvergenz. Bei dem reversiblen, reibungsfreien System lässt sich keine orientierte Konvergenz ablesen. Der Prozess läuft stets gleich ab und kennt keinen statischen Endzustand. Der irreversible Prozess eines gedämpften Schwingungssystem hingegen hat durch die Reibung eine orientierte Konvergenz bekommen. Aus dem Verlauf der Schwingung ist schnell ersichtlich, dass die Auslenkungen (Abbildung 2.6 oben) kleiner werden. Bis schließlich keine Auslenkung der Masse mehr wahrnehmbar sind. Das System hat seinen stationären Endzustand erreicht und wird sich ohne ein äußeres Einwirken nicht mehr ändern. Die gesamte Energie, die bei der Auslenkung der Feder zum Ausgangszeitpunkt t_0 dem System zugeführt wurde, ist durch Dissipation vollständig abgebaut.

Für das potenzialbasierte Formen ist die angesprochene Prozessrichtung von wesentlicher Bedeutung. Aus dem Verlauf der potenziellen Energie ist deutlich zu sehen, welcher Endzustand erreicht wird. Dieser befindet sich am Ort der kleinsten potenziellen Energie, die das System annehmen kann. Die kleinste potenzielle Energie hat das System exakt dann, wenn die Feder entspannt ist. Dies ist im aufgeführten Beispiel bei $x = 0$ der Fall. Ist der räumliche Verlauf der potenziellen Energie bekannt, lässt sich für ein dissipatives System der Endzustand ablesen. In der Abbildung 2.8 ist die potenzielle Energie bezüglich der Raumkoordinate aufgetragen. Der stationäre Endzustand dieses Systems ist in der graphischen Darstellung mit der Kenntnis, dass das System ein potenzielles Minimum annimmt, sofort ablesbar.

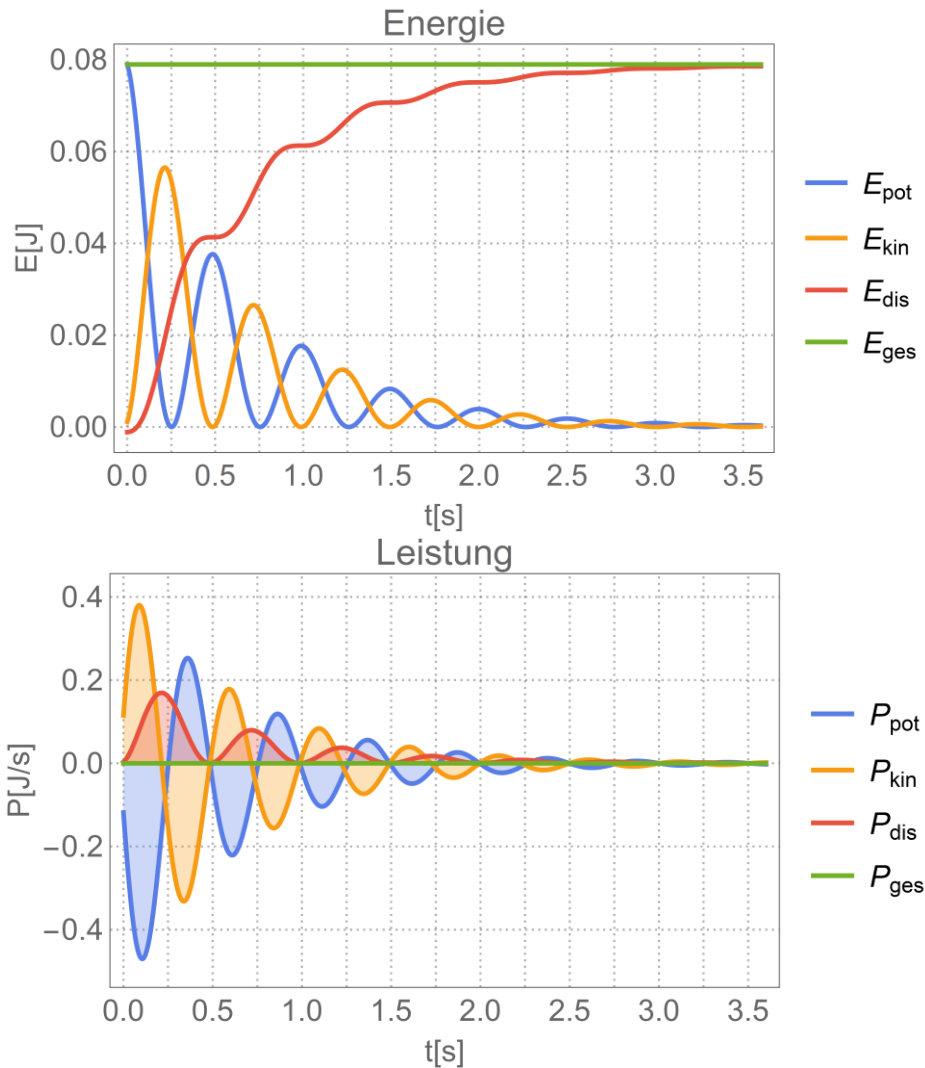


Abbildung 2.7: Gedämpftes Schwingungssystem: Oben ist die Energie, unten die Leistung über der Zeit aufgetragen.

Dieser Vorgang ist, wie bereits erwähnt, durch eine Maximierung der Entropie zu erklären. Wie im linken Diagramm der Abbildung 2.7 zu sehen ist, wird die gesamte Energie des Systems in Dissipationsenergie umgewandelt. Das entspricht der größtmöglichen Entropieproduktion, die das System leisten kann. Durch die Umwandlung der mechanischen Energie in Wärme wird Entropie erzeugt, die einfach ausgedrückt die Unumkehrbarkeit dieses Vorgangs quantitativ erfasst. Für das aufgeführte Beispiel soll die Entropie nur qualitativ beschrieben werden. Die Entropieänderung ΔS berechnet sich aus der Wärme ΔQ , die in dem aufgeführten Beispiel der dissipierten Energie E_{dis} entspricht, und der Temperatur T , bei der der Vorgang abläuft:

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T}. \quad (2.12)$$

Ob diese Entropieänderung zusammen mit der erzeugten Wärme ΔQ in dem System verbleibt oder an die Umgebung abgegeben wird, ist für den dargestellten Prozess nicht von besonderer Bedeutung. Die Wärme könnte, wenn es sich um ein abgeschlossenes System handelt, in der Feder und in der Masse gespeichert werden, ohne dass eine makroskopische Bewegung der Masse zu beobachten wäre. Andernfalls wird sie an die Umgebung abgegeben, was für die meisten Systeme zutrifft. Dabei wird die Entropie zusammen mit der Wärme an die Umgebung abgegeben. Die Entropie des Systems nimmt folglich ab. Durch beide Betrachtungsweisen, ob durch eine Maximierung der Entropie oder durch eine Minimierung der potenziellen Energie, lassen sich Prozessentwicklungen bzw. Endzustände von Systemen abschätzen. Sie geben eine Richtung vor, einen zeitlichen Verlauf und beschreiben wie sich etwas ändert. In einigen Arbeiten wird die Entropie auch als „Antrieb“ für Prozesse beschrieben [Schlichting, 2001]. Auch bei einer Prozessbeschreibung auf der Basis potenzialbasierter Formalismen, ist stets eine Zunahme der Entropie zu beobachten. In den meisten Fällen wird die erzeugte Entropie an die Umgebung abgegeben. Dadurch nimmt die Entropie des betrachteten Systems ab oder bleibt konstant. Nur im Fall eines vollständig reversiblen Vorganges nimmt die Entropie nicht zu.

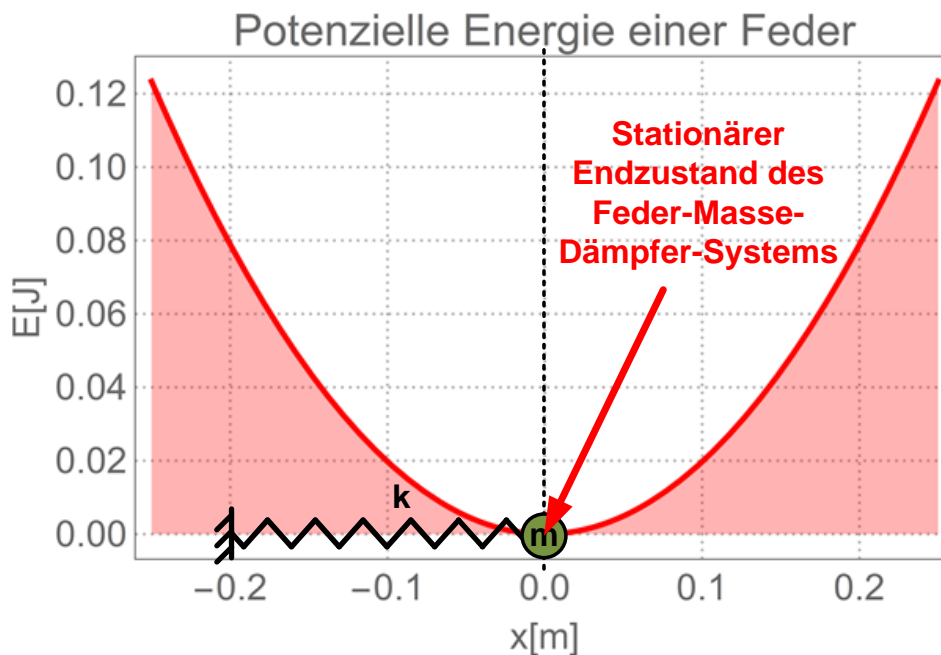


Abbildung 2.8: Potenzielle Energie einer Feder in Abhängigkeit von der Auslenkung x . Der Ort, an dem die potenzielle Energie am kleinsten ist, entspricht dem stationären Endzustand eines Systems, solange kein Kriechfall durch zu große Dämpfungswerte vorliegt.

2.2 Der feine Unterschied zwischen der potenziellen Energie und dem Potenzial

Die potenzielle Energie ist eine skalare Größe, die einem Objekt einen Energiewert zuordnet. In den meisten Fällen wird sie als relative Größe angegeben, da sie sich auf einen festgelegten Bezugspunkt bezieht. Bei der Angabe einer potenziellen Energie einer Feder zum Beispiel ist der Bezugspunkt in der Regel die Ruhelage der Feder. Die potenzielle Energie einer Masse wird im Schwerfeld der Erde, relativ zu einer Höhenlage mit $h = 0$ festgelegt. Die angegebene Energie ist dann von diesem Bezugspunkt aus definiert. Mit der Gravitationsbeschleunigung g und der Masse m des Körpers sowie dem Höhenunterschied Δh gilt:

$$E_{pot} = m \cdot g \cdot \Delta h. \quad (2.13)$$

Das Potenzial $U(\vec{r})$ ist eine skalare Funktion, die die räumliche Verteilung der potenziellen Energie eines Raumes oder eines Objektes, wie zum Beispiel die einer Feder, beschreibt. Das Gravitationspotenzial $\phi(\vec{r})$ der Erde, welches im Kapitel 2.5.1 „Zum Gravitationspotenzial“ beschrieben wird, gibt die relative Energie eines Körpers an. Erst durch die Multiplikation mit einer gegebenen Masse m ergibt sich die potenzielle Energie als Funktion des Ortes $V(\vec{r}) = m \cdot \phi(\vec{r})$. In Abbildung 2.9 ist der Unterschied zwischen dem Potenzial und der potenziellen Energie als Funktion des Orts für das harmonische Potenzial einer Feder dargestellt. Die Funktion $U(x) = \frac{1}{2}x^2$ ist das Potenzial. Erst durch die Erweiterung mit der Federkonstante k erhält die Kurve die physikalische Einheit *Joule* der Energie. Die Funktion der potenzielle Energie liefert eine Prognose oder die Möglichkeit, welche potenzielle Energie der Körper an einem bestimmten Orten im Raum einnehmen kann. So gesehen kann das Potenzial als Funktion der Energieverteilung im Raum interpretiert werden, in dem das Potenzial eine noch nicht ausgeschöpfte Möglichkeit beschreibt. Es handelt sich also um einen Zustand, den ein System annimmt, wenn es dieses Potenzial „ausschöpft“ bzw. im Fall des Gravitationspotenzials $\phi(\vec{r})$ der Erde – dem eine Masse sich an einem bestimmten Ort befindet. Erst dann nimmt die Masse für diesem Ort den prognostizierten Zustand als potenzielle Energie an.

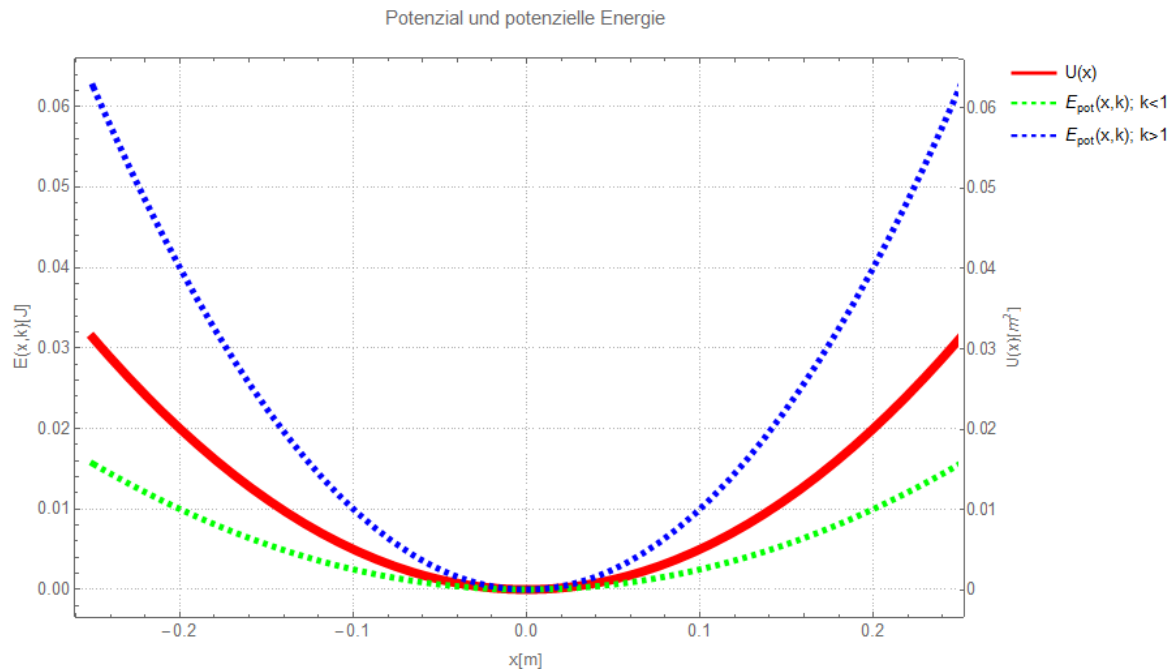


Abbildung 2.9: Unterschied zwischen der potenziellen Energie $E_{\text{pot}}(x, k)$ und dem Potenzial $U(x)$. Das Potenzial $U(x)$ beschreibt qualitativ den Verlauf der Energie und gibt somit nur die „Form“ des Verlaufes vor. Die potenzielle Energie als Funktion des Weges hingegen beschreibt die potenzielle Energie, die an diesem Ort tatsächlich wirken würde. Der feine Unterschied ist der Proportionalitätsfaktor k der Feder.

Beim potenzialbasierte Formen sollen die Möglichkeiten ausgenutzt werden, die Potenziale des Systems durch geschickte Einflussnahmen derart zu steuern, dass sich optimale Leichtbaustrukturen bilden. Alle Potenziale beschreiben die Energiezustände, die ein System einnehmen kann. Dabei ist der Zustand, welcher die geringste potenzielle Energie hat, bei einem offenen System bevorzugt. Sind die einzelnen Potenziale eines Systems in ihrer Wechselwirkung bekannt, können Prozesskinetik und der Endzustand durch die Steuerung des Potenzialminimums manipuliert werden.

2.3 Selbstorganisierte physikalische Systeme

Selbstorganisation ist in der Physik als spontane Entstehung **stabiler** und **regelmäßiger Strukturen** in **dissipativen Systemen** definiert [Melcher, 2004]. Die Ordnungsprinzipien, die hinter einem selbstorganisierten Prozess stehen, sind hochkomplex und bis heute nicht vollständig verstanden. Die wichtigsten Einflussfaktoren eines selbstorganisierten Prozesses können auf die charakteristischen Eigenschaften der beteiligten Atome oder Moleküle sowie auf die Randbedingungen, bei denen die Prozesse ablaufen, zurückgeführt werden [Schlichting, 1994]. Das Ergebnis eines selbstorganisierten Prozesses ist eine zeitlich stabile Struktur. Die Struktur kann sich

als Festkörper ausbilden oder in Form eines dynamisch geordneten Vorgangs manifestieren. Kristalle sind stets Ergebnisse selbstorganisierter Prozesse. Ihre Präzision und ihre hervorragende Eigenschaften zeigen, welches Nutzungspotenzial in den Möglichkeiten der Selbstorganisation besteht. Auch wabenförmige Muster, die sich beim Austrocknen gewöhnlicher Schlammputzen bilden, sind Ergebnisse selbstorganisierter Vorgänge.



Abbildung 2.10: Links: Beim Austrocknen von Schlammputzen entstehen „selbstorganisierte“ wabenförmige Rissstrukturen. Entnommen aus:[Bild1, 2015]. Rechts: Der Bergkristall entsteht durch einen selbstorganisierten potenzialbasierten Prozess, entnommen [Fuchs, 2015].

Es gibt dynamische Systeme bei denen sich stabile wabenförmige fluide Muster ausbilden, z.B. bei der sogenannte Rayleigh-Bénard-Konvektion. Sie entstehen durch thermodynamische fluide Konvektionsbewegungen. Dynamische Systeme können als Nichtgleichgewichtssysteme bezeichnet werden. Sie sind im Alltag häufig anzufinden. Das Abbrennen einer Kerze sowie ein Flussnetzwerk sind Beispiele eines Nichtgleichgewichtssystems, das durch ständige Energie- und Materiezufuhr aufrechterhalten wird [Schlichting 2000/2].

Damit ein selbstorganisierter Vorgang ablaufen kann, muss sich das System zunächst fernab vom thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Das bedeutet, dass das System einen suboptimalen Anfangszustand besitzt. Während des Prozessablaufs strebt das System einen neuen Gleichgewichtszustand an. Dies setzt voraus, dass die freie Enthalpie (Gibbs-Potenzial) ungleich null ist. Sobald die freie Enthalpie null ist, hat der Vorgang seinen neuen stationären Gleichgewichtszustand erreicht. Dieser zeichnet sich häufig durch eine ausgeprägte Struktur oder Musterbildung aus. Damit sich die freie Enthalpie minimieren kann, sind die **Offenheit** und die **Nichtlinearität** des Systems eine Grundvoraussetzung. Nur dann besteht für das System

die Möglichkeit, einen stationären Endzustand zu erreichen, bei dem das totale Differenzial der freien Enthalpie G null werden kann ($dG = 0$). Melcher et al. schreiben in dem Bericht „Selbstorganisierte Strukturen“ [Melcher, 2001]: „Durch die Abhängigkeit des Potenzials von den Zustandsgrößen, wie Druck und Temperatur, sind prinzipiell alle Wechselwirkungen in dem System gezielt steuerbar, da sie als Kräfte eindeutig in Betrag und Richtung durch den negativen Gradienten des Potenzialfeldes festgelegt sind.“ [Melcher, 2004].

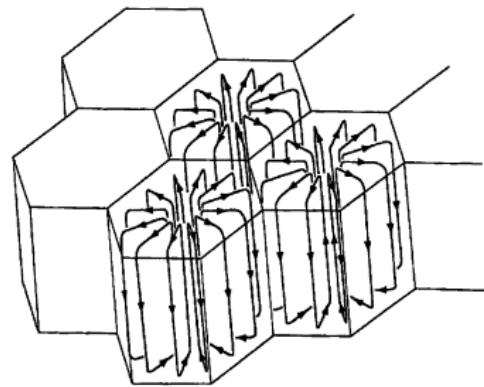
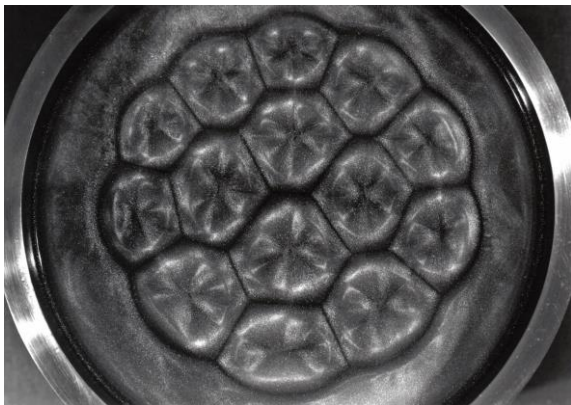


Abbildung 2.11: Selbstorganisierter Prozess: links: Bei der Rayleigh-Bénard-Konvektion entstehen wellenförmige Strukturen entnommen aus: [Jung, 1998]. Rechts ist der Strömungsvorgang der Rayleigh-Bénard-Konvektion schematisch dargestellt, entnommen aus: [Tullius, 2015].

Die Vorgänge lassen sich anschaulich auch durch einen Energiefluss (Leistung) beschreiben. Besonders deutlich ist dies bei dynamischen dissipativen Strukturen zu beobachten, so auch bei der Rayleigh-Bénard-Konvektion. Ein stetiger Energiefluss (Wärme), der dem Fluid von unten zugeführt wird und an der Oberfläche wieder austritt, setzt zunächst den Umwälzvorgang der Flüssigkeit in Gang. Der stationäre Zustand zeichnet sich durch das dynamische Gleichgewicht aus. Die Bewegung des Fluids an sich benötigt keine weitere Energie. Die zugeführte Energie gleicht lediglich die Verluste des Systems aus und hat daher keinen Einfluss mehr auf die Strukturbildung.

Bei Prozessen, die als Endprodukt einen mechanisch festen Zustand einnehmen, ist nur eine einmalige Aktivierungsenergie erforderlich. Nachdem die erforderliche Energie dem System zugeführt wurde, läuft der Prozess ohne eine weitere Energiezufuhr ab. Der weitere Verlauf des selbstorganisierten Prozesses beruht allein auf den Eigenschaften der beteiligten Teilchen und der Randbedingungen. „Überschüssige“ (Gibbs-Potenzial) Energie muss das System zwingend abgeben können, damit die Teilchen ein potenzielles Minimum einnehmen können. Diese Tatsache lässt sich

sehr gut an dem Reaktionspotenzial von Teilchen oder Systemen verdeutlichen. In der Abbildung 2.12 ist ein Reaktionspotenzial zwischen zwei Teilchen aufgetragen. Die y-Achse gibt die freie Enthalpie eines Teilchens über eine Reaktions- oder Ortskoordinate an. Wenn ein selbstorganisierter Prozess ablaufen soll, muss der als Potenzialwall gekennzeichnete Bereich im Energiediagramm überwunden werden. Sobald ein Teilchen oder ein System auf das Energieniveau des Potenzialwalls gebracht wurde, kann der Vorgang selbständig ablaufen. Dabei muss das Teilchen Energie abgeben können. Nur dann ist es in der Lage, den Endzustand des energetischen Minimums erreichen zu können.

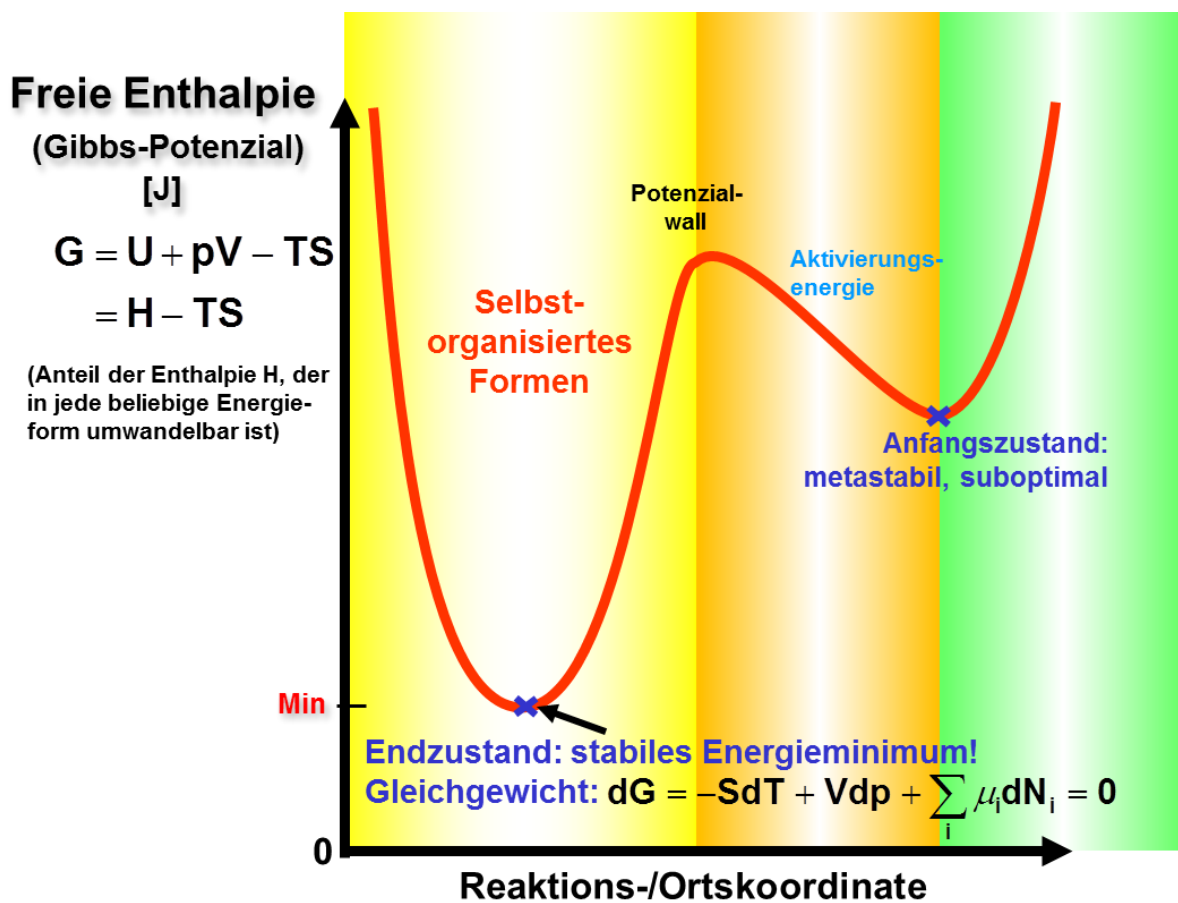


Abbildung 2.12: Potenzialverlauf eines Teilchen. An dem Potenzial sind zwei mögliche stationäre Endzustände zu sehen. Diese befinden sich in den „Vertiefungen“ der Potenzialkurve. Befindet sich das System in einem höhergelegenen Zustand, ist das System metastabil. Erreicht das System den unteren Zustand, wird der Zustand als stabil bezeichnet, entnommen: [Melcher, 2004].

Um die Selbstorganisation in technischen Systemen zu nutzen, sind die Kenntnisse der Systempotenziale und deren Nutzungsmöglichkeiten erforderlich. Der zuvor beschriebene Vorgang lässt theoretisch zwei Endzustände zu (siehe Abbildung 2.12). Damit sichergestellt ist, dass der stabilere Zustand, das ist der des globalen Poten-

zialminimums, eingenommen wird, muss eine potenzialmanipulierende Maßnahme getroffen werden. Nur so kann ein gewünschter Verlauf des Prozesses gewährleistet werden. Dem Verlauf muss dafür eine klare Richtung vorgegeben werden. Diese Richtungsvorgabe soll beim potenzialbasierten Modellieren selbstorganisierter Systeme mit der gezielten Steuerung des Potentials erfolgen. Damit das System nur noch ein einziges Potenzialminimum „kennt“, ist zusätzlich zur Anhebung der Systemenergie auf das Niveau des Potenzialwalls mittels Verformung der Potenzialkurve notwendig. Diese Beeinflussung ist der Kern eines kontrollierten selbstorganisierten Prozesses. Die Potenzialkurve nimmt aus Sicht des Teilchens den Verlauf der in Abbildung 2.13 rot gestrichelten Kurve an.

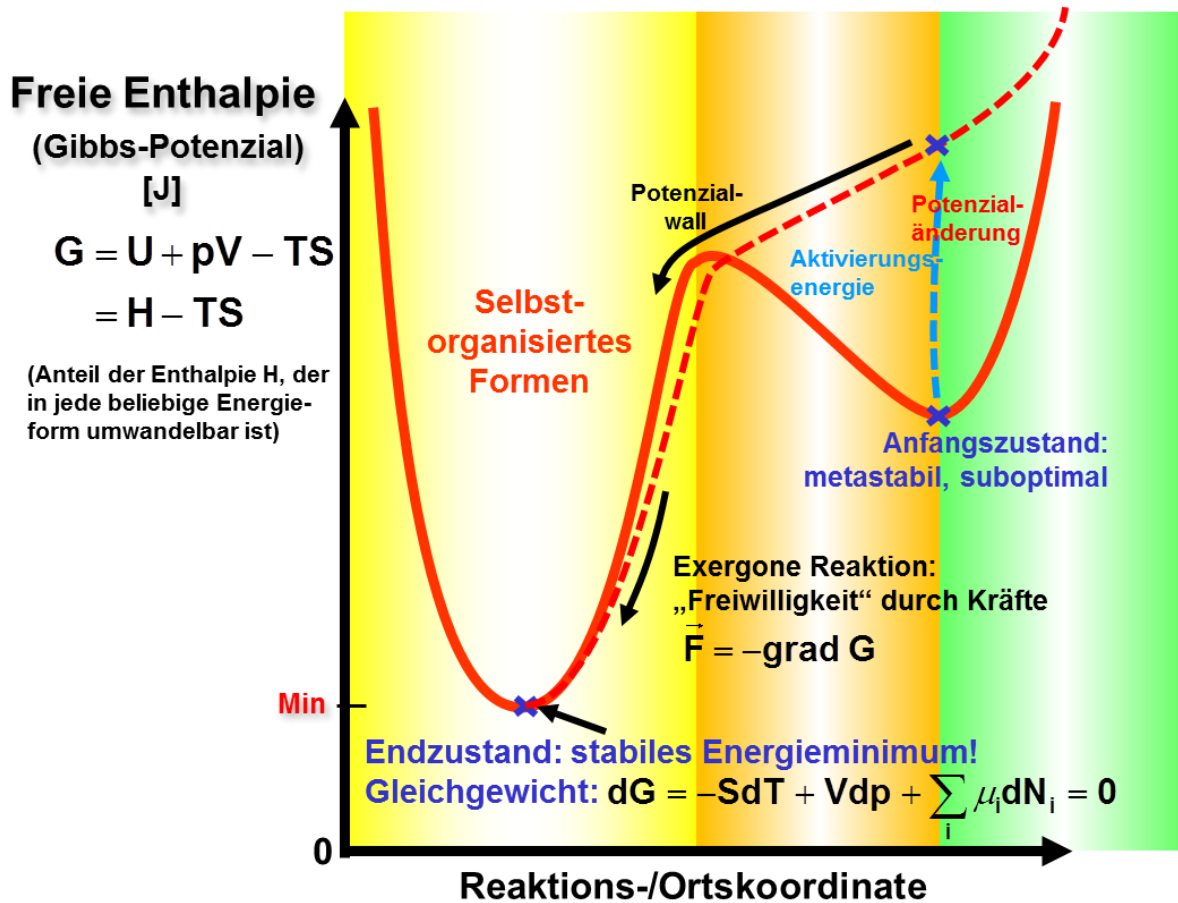


Abbildung 2.13: Potenzialverlauf eines Teilchens. An dem Potenzial sind zwei mögliche stationäre Zustände zu sehen. Durch Manipulation des ursprünglichen Potentials (rote Kurve) ergibt sich der rot gestrichelte Potenzialverlauf, entnommen: [Melcher, 2004].

Um Systeme potenzialbasiert steuern zu können, führen Melcher et al. folgende Potenziale auf:

- elektrische Potenziale
- Gravitationspotenzial
- thermische Potenziale
- magnetische Potenziale
- Bindungspotenziale von Atomen
- mechanische Potenziale
- optische Potenziale **[Melcher, 2004]**

Perfekte Regelmäßigkeiten, größtmögliche Steifigkeiten bei minimalen Materialeinsatz sind nur einige Vorteile selbstorganisierter Prozesse. Sie sollen im Hochleistungsleichtbau zum Einsatz kommen. Im Gegensatz zu konventionellen Fertigungsverfahren, wie Trennen oder spanende Bearbeitung, soll die gewünschte Endtopologie durch einen potenzialbasierten Prozess erreicht werden. Aufwändige Fräs- und Drehprozesse fallen fielen somit weg.

2.4 Elektrische Potenziale und Felder

Die elektromagnetische Wechselwirkung ist eine der vier fundamentalen Wechselwirkungen des Standard-Modells der Physik. Sie tritt in Form von elektrischen und magnetischen Erscheinungen auf und wird durch die *Maxwell-Gleichungen* vollständig beschrieben. Die elektrischen und magnetischen Wechselwirkungen werden in vier Grundgleichungen zusammengefasst. Durch die Verknüpfung der Feldgrößen \vec{E} , \vec{D} , \vec{H} und \vec{B} lassen sich zahlreiche elektromagnetische Erscheinungen beschreiben **[Halliday, 2013]**. Dabei ist \vec{E} die elektrische Feldstärke, welche durch die Verknüpfung mit der dielektrischen Leitfähigkeit ε die elektrischen Flussdichte \vec{D} ergibt:

$$\vec{D} = \varepsilon \cdot \vec{E}. \quad (2.14)$$

Analog zur elektrischen Flussdichte ergibt sich die magnetische Flussdicht \vec{B} aus der magnetischen Permeabilität μ und der magnetischen Feldstärke \vec{H} zu:

$$\vec{B} = \mu \cdot \vec{H}. \quad (2.15)$$

Sowohl die dielektrische Leitfähigkeit ε als auch die magnetische Permeabilität μ sind Materialkonstanten. Die magnetische Polarisation \vec{J} ergibt sich aus der magnetischen Suszeptibilität χ_m und der Vakuumflussdichte \vec{B}_0 gemäß:

$$\vec{J} = \chi_m \cdot \vec{B}_0. \quad (2.16)$$

Aus diesen drei Feldgleichung (2.14), (2.15) und (2.16) lassen sich alle elektrischen und magnetischen Erscheinungen beschreiben **[Hering, 1989]**. Da für die Simulation potenzialbasierte Formungsprozesse nur quasistatische Vorgänge im Rahmen dieser Arbeit betrachtet werden, sei im folgenden nur stationäre, also zeitunabhängige Felder, erläutert. Die Elektrodynamik wird also bei der Betrachtung der potenzialbasierten Prozesse zur Vereinfachung vernachlässigt, da lediglich quasistatische Vorgänge betrachtet werden.

2.4.1 Zum Feldbegriff

In der Physik beschreibt ein Feld eine räumliche Verteilung einer physikalischen Größe. Sie ist nicht nur einem Punkt wirksam, sondern durchaus unendlich ausgeht. Mathematisch lässt sich ein Feld als Funktion des Ortes darstellen:

$$U = U(x, y, z), \quad (2.17)$$

wobei U die physikalische Größe in abhängig des Ortes angibt. Handelt es sich um ein zeitvariantes Feld, gilt nach **[Hering, 1989]**:

$$U = U(x, y, z, t). \quad (2.18)$$

Zeitvariante Felder werden auch als instationär Systeme bezeichnet (z.B. turbulente Strömungen). Zeitinvariante Felder sind stationär z.B. laminare Strömungen in einem

Rohr. Die physikalische Größe kann - abhängig von dem betrachteten Feld - eine skalare oder eine vektorielle Größe sein. Skalare Felder sind beispielsweise: das Gravitationspotenzial, das elektrostatische Potenzial oder auch Temperaturfelder. Jedem Punkt im dreidimensionalen Raum ist dann einer skalaren Größe, also einer reellen Zahl, zugeordnet **[Bronstein, 2012]**.

Ein vektorielles Feld beinhaltet zur vollständigen Charakterisierung dagegen eine Maßzahl und eine Richtungsangabe **[Bronstein, 2012]**. Beispiele solcher Felder sind das Gravitationsfeld, elektrische Felder oder Strömungsfelder. Der wesentliche Unterschied zwischen skalaren und vektoriellen Feldern ist die Richtungsabhängigkeit ihrer Eigenschaften. Ein skalares Feld weist zunächst keine Richtung auf. Wohingegen ein vektorielles Feld jedem Punkt im Raum eine Richtung zugeordnet ist.

2.4.2 Zur elektrischen Ladung und zum Coulomb-Gesetz

Es gibt drei Arten von elektrischen Ladungen: positive, negative und solche, die keine Ladung besitzen. Mit den beiden erstgenannten kann eine Anziehung oder eine Abstoßung von Teilchen einher gehen. Ladungen liegen quantisiert vor. Die kleinste, frei existierende elektrische Ladungsmenge ist die Elementarladung e . Sie ist eine Naturkonstante und hat nach **[Weissmentel, 1995]** den Wert:

$$e = 1,6021766 \cdot 10^{-19} \text{C}. \quad (\text{rel. Unsicherheit } 6,1 \cdot 10^{-9}) \quad (2.19)$$

Das Elektron und das Myon besitzen den Ladungswert $-e$. Das Positron und das Proton haben dagegen die Ladung $+1e$. In der Teilchenphysik gibt es noch weitere positive bzw. negativ geladenen Teilchen. Diese spielen bei potenzialbasierten Formungsprozessen im meso- und makroskopischen Bereich eine unbedeutende Rolle und werden daher in der Vorliegenden Arbeit nicht weiter betrachtet.

Ein Elektronenüberschuss bedeutet im makroskopischen Bereich, dass eine negative Ladung vorliegt. Bei einem Elektronenmangel liegt eine positive Ladung vor. Der Transport von Ladungen erfolgt durch die Verschiebung von Elektronen, positiv und negativ geladenen Ionen. Elektrische Ladungen üben Kräfte aufeinander aus. Gleichnamige Ladungen stoßen sich gegenseitig ab, ungleichnamige Ladungen zie-

hen sich gegenseitig an. Für zwei Punktladungen Q_1 und Q_2 , die sich in einem Abstand r_{12} voneinander befinden, gilt das **Coulomb'sche-Gesetz**:

$$\vec{F}_{12} = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{Q_1 \cdot Q_2}{r_{12}^2} \cdot \frac{\vec{r}_{12}}{r_{12}} \quad (2.20)$$

Die resultierenden Kräfte \vec{F}_{12} bzw. \vec{F}_{21} (wobei $\vec{F}_{12} = -\vec{F}_{21}$ ist) wirken auf der Verbindungslinie zwischen den beiden Ladungen. Sind die beiden Punktladungen Q_1 und Q_2 gleichnamig (gleiches Vorzeichen), zeigen die Kräfte in die entgegengesetzte Richtung des anderen Teilchen – sie stoßen sich gegenseitig ab.

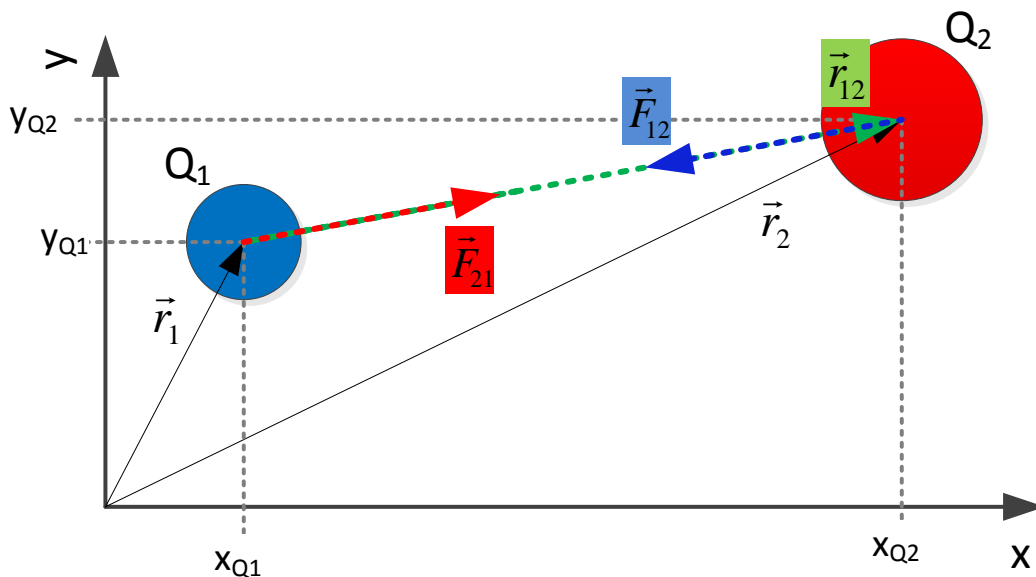


Abbildung 2.14: Coulomb'sches Gesetz am Beispiel zweier Punktladungen ($Q_1 = -10^{-6} \text{ C}$, $Q_2 = 3 \cdot 10^{-6} \text{ C}$). Zwei ungleichnamige Ladungen ziehen sich gegenseitig an.

Der erste Term in der Gleichung (2.20), $(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0)^{-1}$, ist der Proportionalitätsfaktor des Coulomb'schen-Gesetzes. Es enthält die elektrische Feldkonstante ε_0 beziehungsweise die Dielektrizitätskonstante des Vakuums, welche sich aus den Maxwell-Gleichungen ergibt:

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{\mu_0 \cdot c_0^2} \frac{\text{C}^2}{\text{Nm}^2}, \quad (2.21)$$

mit $\mu_0 = 4 \cdot \pi \cdot 10^{-7} \text{ N/A}^2 = 12,56637 \cdot 10^{-7} \text{ N/A}^2$ und der Lichtgeschwindigkeit im Vakuum mit $c_0 = 299792458 \text{ m/s}$ ergibt sich die elektrische Feldkonstante $\varepsilon_0 = 8,85418782 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Nm}^2$. Der Proportionalitätsfaktor des *Coulomb'schen Gesetzes* ergibt sich dann zu:

$$\frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} = 8,988 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Nm}^2}{\text{C}^2}. \quad (2.22)$$

Der Verbindungsvektor \vec{r}_{12} berechnet sich aus der Differenz der beiden Ortsvektoren \vec{r}_1 und \vec{r}_2 zu den Ladungen gemäß:

$$\vec{r}_{12} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1. \quad (2.23)$$

Der Betrag beziehungsweise der Abstand r_{12} zwischen den Ladungen ist demnach:

$$r_{12} = |\vec{r}_{12}| = \sqrt{(x_{Q2} - x_{Q1})^2 + (y_{Q2} - y_{Q1})^2}. \quad (2.24)$$

Das Coulomb'sche Gesetz von zwei ungleichnamigen Ladungen Q_1 und Q_2 in Abhängigkeit ihres Abstandes zeigt die Abbildung 2.15. Die Ladung Q_1 liegt dabei im Ursprung des Koordinatensystems. Auf der Abszisse ist der Abstand der zweiten La-

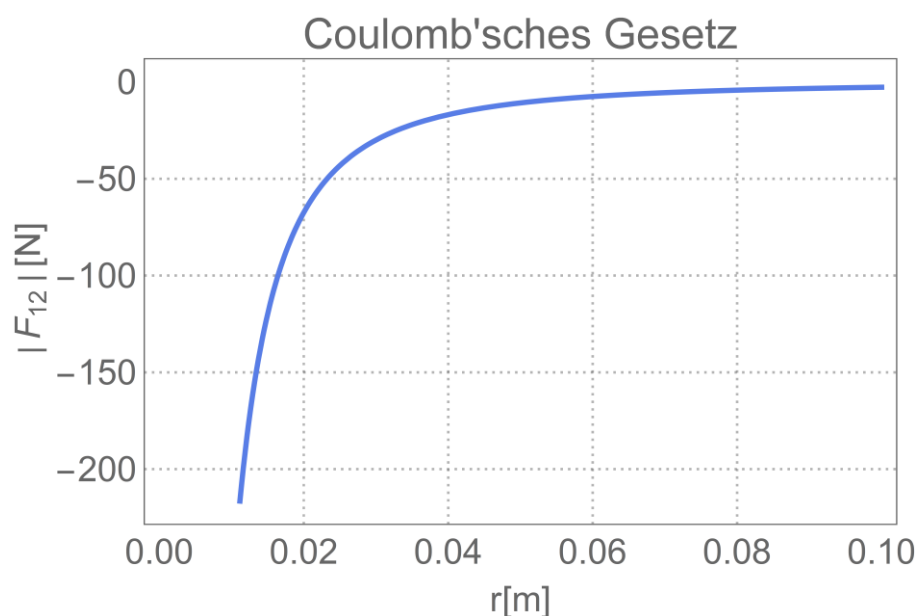


Abbildung 2.15: Coulomb'sches Gesetz am Beispiel zweier Punktladungen ($Q_1 = -10^{-6} \text{ C}$, $Q_2 = 3 \cdot 10^{-6} \text{ C}$), wobei sich Q_1 im Ursprung des Koordinatensystems befindet, und Q_2 sich auf der Abszisse bewegt. Dargestellt ist die Kraft, welche auf die Ladung Q_2 abhängig von Abstand r_{12} wirkt.

dung Q_2 aufgetragen. Die Ordinate gibt die Kraft an, welche auf die Ladung Q_2 wirkt. Die Coulomb-Kraft ist für kleinen Abstände sehr groß und nimmt mit dem zunehmenden Abstand schnell ab.

Eine dreidimensionale Darstellung des Coulomb'schen Gesetzes befindet sich in der Abbildung 2.16. Auf der z -Achse ist die Kraft aufgetragen, welche auf die zweite Ladung wirkt. Sie ist radialsymmetrisch und somit nur von Abstand r_{12} zwischen den Teilchen abhängig. In einer dreidimensionalen Beschreibung ist sie kugelsymmetrisch.

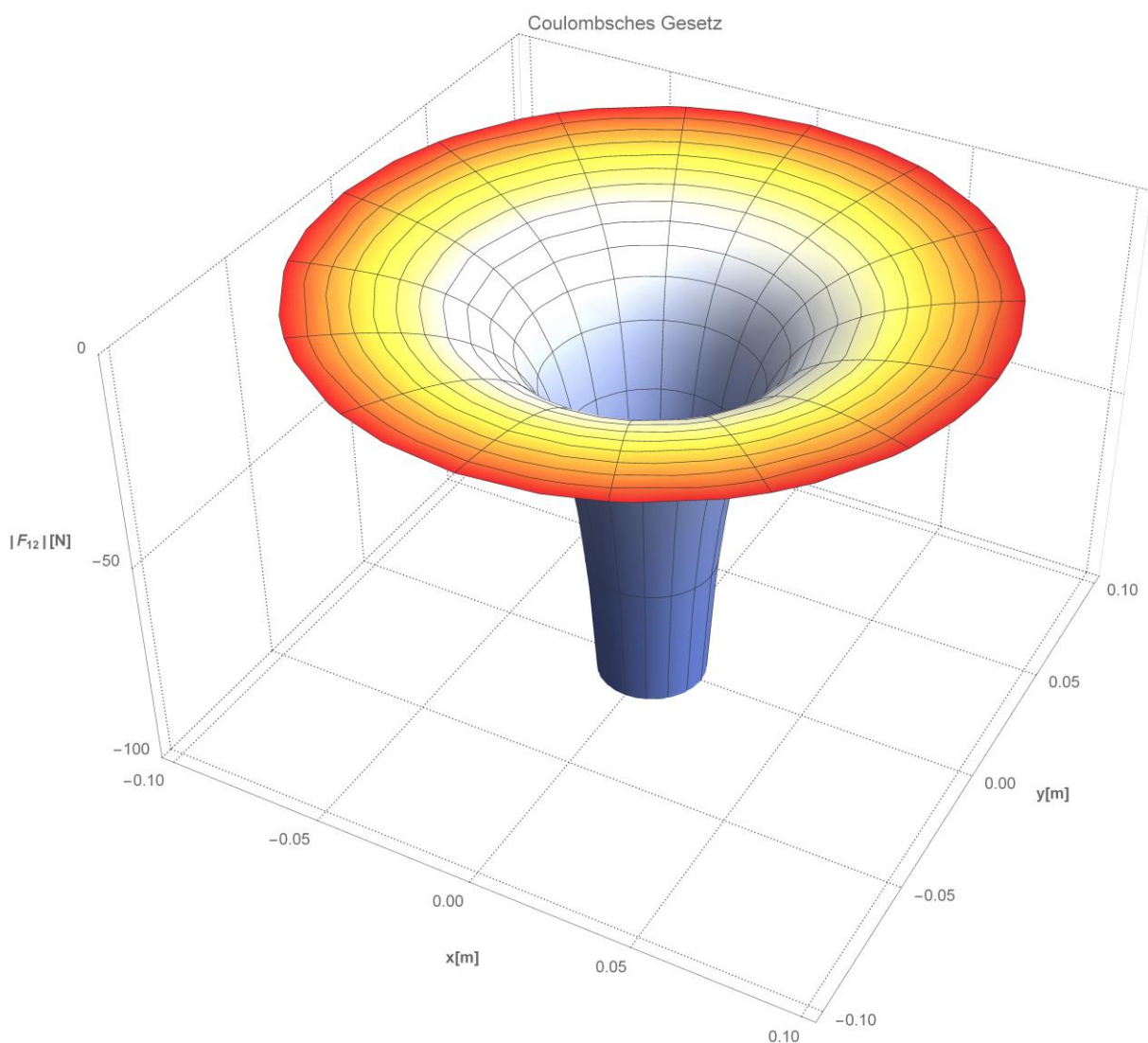


Abbildung 2.16: Coulomb'sches Gesetz am Beispiel zweier Punktladungen in der xy -Ebene ($Q_1 = -10^{-6} \text{ C}$, $Q_2 = 3 \cdot 10^{-6} \text{ C}$), wobei sich Q_1 im Ursprung des Koordinatensystems befindet. In z -Richtung ist die Kraft aufgetragen, welche auf die Ladung Q_2 abhängig vom Abstand r_{12} wirkt.

Das Coulomb'sche Gesetz wirkt auf Ladungen mit verschiedenen Vorzeichen wie das Gravitationsgesetz auf Massen. Es gilt für die Kraft, die zwischen zwei Massen m_1 und m_2 wirkt:

$$\vec{F}_{12} = -G \cdot \frac{m_1 \cdot m_2}{r_{12}^2} \cdot \frac{\vec{r}_{12}}{r_{12}}. \quad (2.25)$$

Dabei ist G die Gravitationskonstante und r_{12} der Schwerpunktabstand der Massen. Die Gravitationskonstante wird mit:

$$G = 6.67428 \cdot 10^{-11} \frac{Nm^2}{kg^2} \quad (2.26)$$

angegeben. Im Gegensatz zur Coulomb-Kraft wirkt die Gravitation zwischen zwei Körpern immer anziehend.

Der Verlauf der Gravitationskraft eines massebehafteten Teilchens entspricht qualitativ dem der Coulomb-Kraft nach Abbildung 2.15 und Abbildung 2.16. Ein wesentlicher Unterschied ergibt sich bei der Betrachtung eines großen massebehafteten Körpers wie zum Beispiel der Erde. Hier muss zwischen den Kräften außerhalb und innerhalb der Oberfläche unterschieden werden. Für die Kräfte außerhalb der Massenoberfläche gilt die Gleichung (2.25). Kräfte, die innerhalb einer homogenen Kugel auf eine zweite Masse wirken, lassen sich durch die folgende Gleichung berechnen:

$$\vec{F}_{12} = -G \cdot \frac{m_1 \cdot m_2}{R^3} \cdot \frac{\vec{r}_{12}}{r_{12}}. \quad (2.27)$$

Dabei sei m_2 die Masse, die sich innerhalb der homogenen Kugel m_1 befindet und R der Radius der Masse m_1 ist. Die Gravitationskraft ist als Funktion des Abstands vom Erdmittelpunkt in Abbildung 2.17 dargestellt. Als Referenzmasse m_2 wurde 1 kg gewählt. Es wird vereinfacht angenommen, dass es sich um eine homogene Massenverteilung und um eine ideale Kugelform handelt. Der Verlauf teilt sich in zwei Bereiche auf: innerhalb der Kugel $r < R$ ist der Betragsverlauf $|\vec{F}_{12}|$ linear. Er steigt bis zum Kugelradius R auf $|\vec{F}_G|$ an. Der Betrag von der Gravitationskraft auf der Erdoberfläche $|\vec{F}_G|$ entspricht der im allgemeinen gebräuchlichen Gravitationsbeschleunigung

von $9,81\text{m/s}^2$ multipliziert mit der Masse von 1 kg , also $9,81\text{N}$. Außerhalb des Kugelradius $r > R$ nimmt der Betrag der Gravitationskraft hyperbolisch ab. Eine Gegenüberstellung der Coulomb-Kraft und der Gravitationskraft ist in der Tabelle 2.1 aufgeführt.

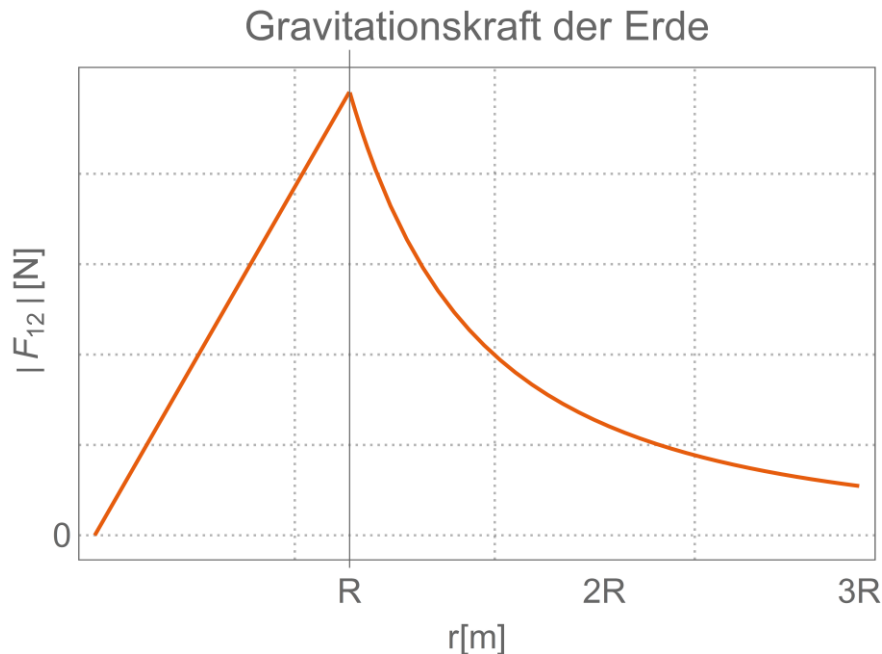


Abbildung 2.17: Gravitationskraft am Beispiel der Erde mit der Annahme einer homogen Massenverteilung und einer Referenzmasse $m_2 = 1\text{ kg}$.

Unterscheidungsmerkmal	Coulomb-Kraft	Gravitationskraft
Ursache	zwei Ladungen	zwei Massen
Kraftrichtung	Anziehung (bei ungleichnamiger Ladung) und Abstoßung (bei gleichnamiger Ladung)	Anziehung
Stärke	groß	sehr klein (relativ zur Coulomb-Kraft)
Abschirmbarkeit	ja	nein (kompensierbar)
Bedeutung	Zusammenhalt der Atome	Zusammenhalt makroskopischer Systeme

Tabelle 2.1: Unterschied zwischen Coulomb-Kraft und Gravitationskraft. In Anlehnung an [Stöcker, 2010].

2.4.3 Zu elektrischen Feldern

Das elektrische Feld, auch E-Feld genannt, ist ein Vektorfeld, welches geladene Teilchen umgibt. Es ordnet jedem Punkt im Raum eine elektrische Feldstärke mit Betrag und Richtung zu. Die Feldvektoren des elektrischen Feldes werden auch als elektrische Feldlinien bezeichnet. Sie geben die Krafrichtung eines positiv geladenen Teilchens an. Ein negativ geladenes Teilchen erfährt eine Kraft in entgegengesetzter Richtung. Die elektrische Feldstärke ist definiert als:

$$\vec{E} = \frac{\vec{F}}{Q} \quad (2.28)$$

\vec{F} ist dabei der Kraftvektor, welcher auf die Probeladung Q wirkt und \vec{E} das elektrische Feld, in dem sich die Probeladung befindet. Elektrische Felder lassen sich im Gegensatz zum Gravitationsfeld abschirmen. Das elektrische Feld einer Punktladung Q nimmt mit dem Quadrat des Abstandes ab und ist:

$$\vec{E} = \frac{Q}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot r^2} \cdot \frac{\vec{r}}{r} \quad (2.29)$$

Das elektrische Feld von N Punktladungen ergibt sich aus der Superposition der elektrischen Feldstärken \vec{E}_i aller Ladungen:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \vec{E}_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \sum_{i=1}^N \frac{Q_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^2} \cdot \frac{\vec{r} - \vec{r}_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} \quad (2.30)$$

Dabei ist \vec{r}_i der Raumvektor der Punktladungen. Aus dem elektrischen Feld lässt sich durch Umstellen von Gleichung (2.28) die Kraft berechnen, welche auf eine Ladung wirkt, die sich in einem elektrischen Feld befindet:

$$\vec{F} = Q \cdot \vec{E} \quad (2.31)$$

Der Verlauf der elektrischen Feldlinien eines positiv und eines negativ geladenen Teilchen ist in den Abbildung 2.18 rechts und links dargestellt. In Abbildung 2.19 ist links das elektrische Feld von zwei positiv, gleich großen Ladungen abgebildet. Das



Abbildung 2.18: Feldlinien eines positiv geladenen Teilchens (links) und eines negativ geladenen Teilchens (rechts).

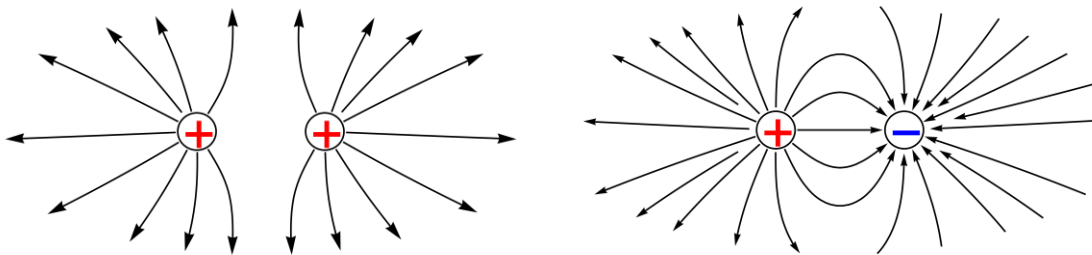


Abbildung 2.19: Feldlinien von: zwei positiv geladenen Teilchen (links), eines positiv- und eines negativ geladenen Teilchens (rechts)

rechte Bild zeigt das Feld von zwei ungleichnamigen, gleich großen Ladungen. Die Felder entstehen durch Überlagerung der beiden Einzelfelder.

Diese Form der Darstellung ist besonders anschaulich. Es lässt sich anhand der Feldlinien die Krafrichtung einer Probeladung, die in das Feld eingebracht wird, sehr einfach abschätzen. Dabei muss allerdings berücksichtigt werden, dass die eingebrachte Probeladung das vorhandene Feld beeinflusst. Ist die Probeladung im Vergleich zur Feldstärke klein, kann der Einfluss der Probeladung jedoch vernachlässigt werden.

2.4.4 Zum Coulomb-Potenzial

Das elektrische Potenzial φ_A ergibt sich aus der potenziellen Energie E_{pot} oder Arbeit W_A einer Ladung in einem elektrischen Feld geteilt durch die Ladung Q :

$$\varphi_A = \frac{W_A}{Q} = \frac{E_{pot}(A)}{Q} = - \int_{\infty}^A \vec{E} \cdot d\vec{s}. \quad (2.32)$$

Dabei sind W_A die Arbeit die $E_{pot}(A)$ potenzielle Energie welche verrichtet bzw. aufgebracht werden muss, um eine Probeladung Q in einem elektrischen Feld \vec{E} von einem Bezugspunkt P zu dem Punkt A zu bringen. Als Bezugspunkt P wird meist ein Punkt im Unendlichen gewählt, an dem der Wert des Potentials null gesetzt wird $\varphi_P = \varphi_\infty = 0$. Demnach ist die potenzielle Energie im unendlichen ebenfalls null $E_{pot}(\infty) = 0$. Durch die Annahme, dass das Potential im unendlichen null ist, hängt das Potential nur noch vom Punkt A ab und ist eine skalare Funktion des Ortes. Das Potential gibt demnach eine Probeladung unabhängige potenzielle Energie des Ortes an.

Es liefert den energetischen Zustand eines elektrischen Feldes unabhängig von der Probeladung für jeden Punkt im Raum. Das Potential ist ein skalar Feld, das jedem Punkt im Raum einen festen Wert zuordnet. Es ist also eine energetische Größe und ein relatives Maß für die potenzielle Energie in einem elektrischen Feld.

Das Potential einer Punktladung Q , die ein kugelsymmetrisches elektrisches Feld besitzt, ist mit dem elektrischen Feld ausgedrückt nach Gleichung (2.29):

$$\begin{aligned}\varphi_A &= - \int_{\infty}^A \vec{E}(\vec{r}) \cdot d\vec{r} = - \int_{\infty}^A \frac{Q}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \vec{r}^2} \cdot d\vec{r} = \left[\frac{Q}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \vec{r}} \right]_{\infty}^A \\ &= \frac{Q}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \vec{r}}.\end{aligned}\tag{2.33}$$

Das Potentialfeld einer Punktladung ist das Integral über das elektrische Feld. Das Potential für eine positive und eine negative Ladung ist in Abbildung 2.20 als Funktion des Abstandes r dargestellt. Wie an dem Verlauf zu sehen ist, entspricht das Potential qualitativ dem des elektrischen Feldes bzw. dem Verlauf der Coulomb-Kraft.

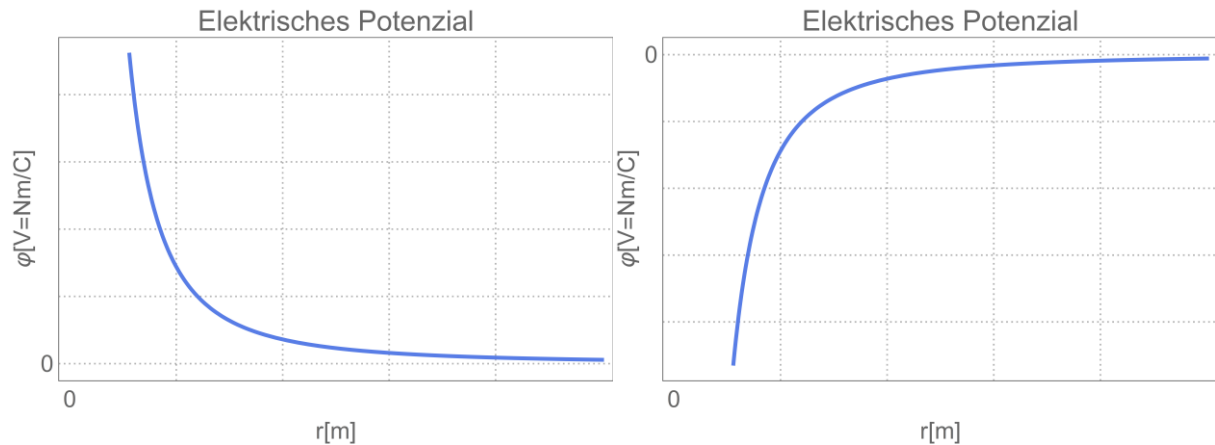


Abbildung 2.20: Elektrisches Potenzial: positiv geladenen Teilchens (links), negativ geladenen Teilchens (rechts).

Stellt man das Potenzialfeld und das elektrische Feld in einem Diagramm dar, wird der Zusammenhang deutlich. Das Potenzial wird als Kontur in Form von „Höhenlinien“ dargestellt, das elektrische Feld in Form von Feldlinien. Die Höhenlinien sind vergleichbar mit den Höhenlinien einer Landkarte. Eine „Höhenlinie“ beschreibt den Verlauf gleichen Potentials im Raum. Anders gesagt: das Potenzial entlang einer „Höhenlinie“ ist konstant. Die Linien gleichen Potentials werden als Äquipotenziallinien bezeichnet.

In Abbildung 2.21 links sind die elektrischen Feldlinien zusammen mit dem Potenzialfeld in Form eines Konturplots dargestellt. Abbildung 2.21 rechts zeigt das elektrische Feld zusammen mit dem Potenzialfeld zweier ungleichnamiger, aber gleich großer Ladungen. Es ist zu erkennen, dass die Feldlinien stets orthogonal zu den Äquipotenziallinien sind. Der Feldlinien, die die Krafrichtung einer dort eingebrachten Ladung indizieren, zeigen stets in die Richtung des steilsten Abstieges des Potenzial.

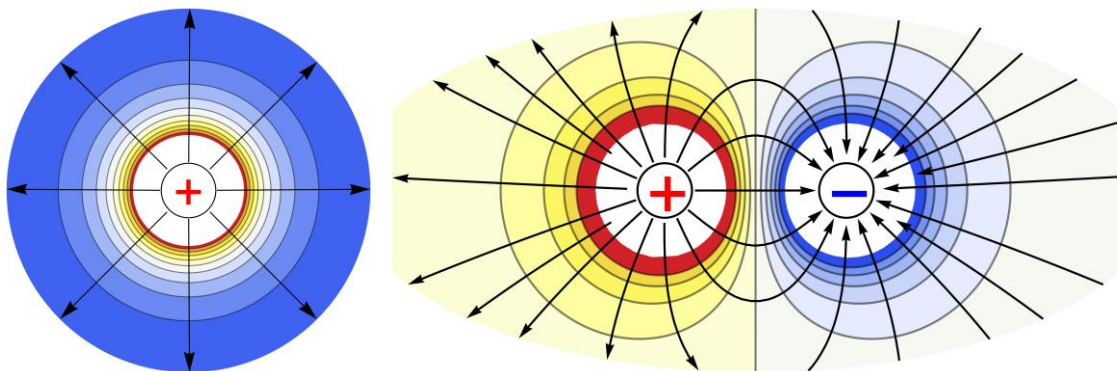


Abbildung 2.21: Elektrisches Potenzial und elektrische Feldlinien: links eines positiv geladenen Teilchens, rechts von zwei ungleichnamig, gleich großen geladenen Teilchen.

Das Potenzial einer Ladung, welche nur in der xy -Ebene betrachtet wird, lässt sich sehr anschaulich in einer dreidimensionalen Darstellung wiedergeben. Das elektrische Potenzial von zwei ungleichnamigen Ladungen ist in Abbildung 2.22 als dreidimensionales „Höhenbild“ gezeigt. Die xy -Ebene ist hier der Wirkungsraum des elektrischen Potenzials. In z -Richtung ist das Potenzial als Funktion des Ortes in der xy -Ebene aufgetragen. Wird in das Feld eine positive Probenladung eingebracht, wird diese, gemäß dem elektrischen Feld nach Abbildung 2.21 rechts, von der negativen Ladung angezogen und von der positiven abgestoßen. Sie „fällt“ sozusagen zur negativen Ladung. In der dreidimensionalen Darstellung lässt sich dies mit einer Kugel vergleichen, welche von einem Berg herunterrollt und im tiefsten Punkt des Tals liegen bleibt (vorausgesetzt, dass es sich um ein reibungsbehaftetes System handelt). Bei diesem Vergleich ist zu beachten, dass die Kugel ihre Position in z -Richtung verändert. Dies ist bei dem Beispiel einer Ladung in der xy -Ebene nicht der Fall. Die Probeladung bleibt immer in der xy -Ebene. Die Änderung in ihrer „Höhe“ in z -Richtung symbolisiert ihre potenzielle Energie. Das ist zwar auch bei der Kugel so, die den Berg hinunterrollt, jedoch ist dort die potenzielle Energie eine Funktion von der Höhe z und nicht nur von den xy -Koordinaten der Kugel abhängig.

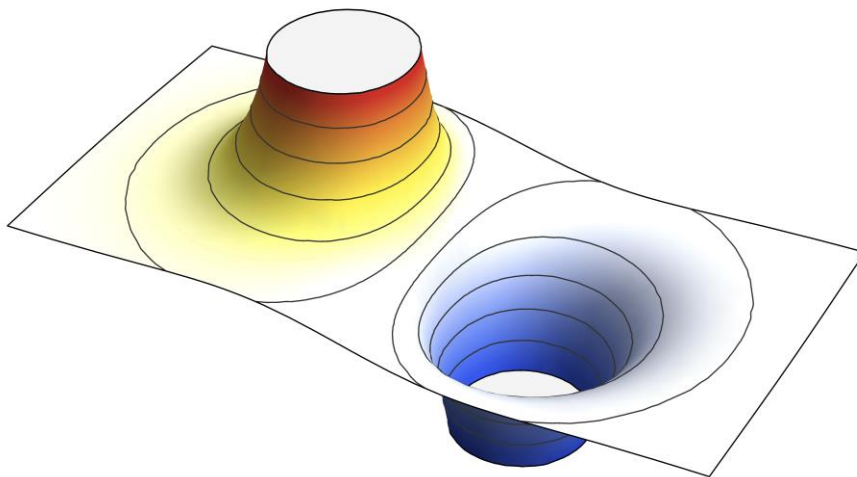


Abbildung 2.22: Elektrisches Potenzial als Höhenmodell zweier ungleichnamiger, gleich großer Ladungen.

Für den Fall, dass eine negative Probeladung in das Potenzialfeld eingebracht wird, bewegt sich diese zur positiven Ladung hin. In der dreidimensionalen Darstellung bedeutet dies, dass die Probeladung sich bergauf bewegt. Hier ist ein Vergleich mit einer massebehafteten Kugel im Gravitationsfeld unbrauchbar, da bisher keine Kugeln bekannt sind, welche selbständig einen Berg hinauf rollen. Im Gravitationsfeld würde dies bedeuten, dass die Kugel Energie aufnehmen müsste. Im elektrischen Feld ist dieser Sachverhalt anders. Die potenzielle Energie einer negativen Probeladung nimmt auch beim Besteigen des „Bergs“ ab. Das liegt an der Tatsache, dass es bei der Gravitation nur anziehende Kräfte gibt, wo hingegen die elektrischen Felder abstoßende und anziehende Kräfte beinhalten.

Die dreidimensionale Darstellung ist eine sehr anschauliche Möglichkeit, um zweidimensionale Potenzialfelder abzubilden. Das Potenzial lässt sich durch diese Darstellungsform in eine leicht verständliche bildhafte Form bringen. Werden dreidimensionale Potenzialfelder betrachtet, ist eine Darstellung in Form eines „Höhenmodells“ nicht mehr möglich. Diese können aber in Form eines Schalenmodells dargestellt werden. Die Abbildung 2.23 zeigt das dreidimensionale Potenzial von zwei ungleichnamigen, gleich großen Ladungen. Jede Schale gibt eine Fläche gleichen Potentials an. Die Farben sind äquivalent zu den Abbildung 2.21 und Abbildung 2.22.

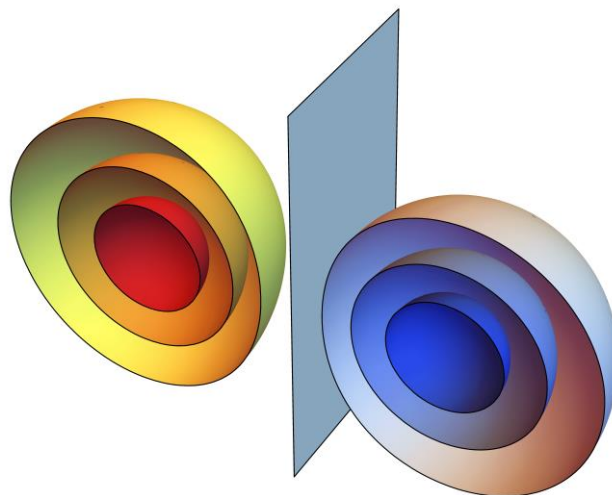


Abbildung 2.23: Elektrisches Potenzial zweier ungleichnamiger, gleich großer Ladungen. Die schalen symbolisieren Flächen gleichen Potentials.

2.4.5 Zum Zusammenhang von dem Potenzial und der Feldstärke

Das Potenzial und die Feldstärke sind zwei unterschiedliche Beschreibungen für denselben Sachverhalt, der besagt: ein Teilchen ist von einem Feld umgeben. Dieses Feld kann durch die Feldstärke oder durch das Potenzial beschrieben werden. Mathematisch sind beide Beschreibungen gleichwertig. Sie lassen sich über den Gradienten bzw. über das Integral ineinander umrechnen. Die Herleitung des elektrischen Potenzials aus dem elektrischen Feld wurde bereits in den Gleichungen (2.32) und (2.33) durch das Integral des elektrischen Feldes beschrieben. Die Feldstärke lässt sich umgekehrt durch die räumliche Ableitung des Potenzials berechnen. Die elektrische Feldstärke ergibt sich durch die Bildung des negativen Gradienten des Potenzials zu:

$$\vec{E} = -\text{grad } \varphi = -\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \vec{e}_z\right). \quad (2.34)$$

Anders ausgedrückt, gibt die Feldstärke die Steigung des Potenzials an einem Ort in die drei Raumrichtungen an. Diese ist proportional zur Kraft, welche in diesem Punkt auf eine Masse oder eine Ladung wirkt. Es wird dabei deutlich, dass das Potenzial und die Feldstärke zwei unterschiedliche, jedoch miteinander gekoppelte, physikalische Größen sind, wobei das Potenzial ein Maß für die potenzielle Energie ist und die Feldstärke ein Maß für die Kraft ist, welche an einem bestimmten Ort wirkt.

Beide Größen haben bei der Betrachtung eines Systems eine wichtige Bedeutung: das Potenzial gibt an, in welchem energetischen Zustand sich ein System zu einem Zeitpunkt befindet. Aus der Ableitung, also der Feldstärke, ergeben sich die Kräfte, die auf ein Teilchen wirken. Diese geben Auskunft darüber, in welche Richtung ein Teilchen beschleunigt wird. Zusammen mit der Betrachtung der kinetischen Energie des Teilchens lässt sich der Bahnverlauf eindeutig berechnen.

2.5 Mechanische Potenziale

Mechanische Potenziale beschreiben gleich wie die elektrischen Potenziale- die potenzielle Energie eines Teilchens oder Objekts bezüglich des Raumes. Der wesentliche Unterschied liegt in der Betrachtungsebene der Systeme. Das Gravitationspotenzial ist im Vergleich zu dem elektrischen Potenzial um ein Vielfaches kleiner. Daher tritt seine Wirkung erst bei sehr großen Massen auf, wie zum Beispiel bei der Erde. Auch das harmonische Potenzial, dass die potenzielle Energie einer Schraubenfeder beschreibt, wirkt erst bei einer sehr großen Teilchenzahl (die Atome, aus der die Feder besteht). Die Wirkung dieser Potenziale ist daher von entscheidender Bedeutung für den makroskopischen Bereich.

2.5.1 Zum Gravitationspotenzial

Das Gravitationspotenzial beschreibt- unabhängig von einer Probemasse- die potenzielle Energie eines homogenen Körpers. Sie ist eine skalare Funktion des Ortes. Dabei muss erneut zwischen dem Potenzial innerhalb und außerhalb der Kugel unterschieden werden. Für eine homogene Kugel lautet das innere Gravitationspotenzial:

$$\phi_I(\vec{r}) = \frac{G \cdot M}{2 \cdot R} \left(\frac{\vec{r}^2}{R^2} - 3 \right), \quad (2.35)$$

das äußere:

$$\phi_A(r) = - \frac{G \cdot M}{\vec{r}}, \quad (2.36)$$

wobei G die Gravitationskonstante ist, M die Masse des Körpers, von dem das Potenzial ausgeht, und R der Radius der Kugel ist. Der Ortsvektor \vec{r} gibt den Abstand vom Mittelpunkt der Kugel an. Es gilt die zusammengesetzte Funktion für das Gravitationspotenzial eines homogenen Körpers:

$$\phi(r) = \begin{cases} \phi_I(\vec{r}) & \text{für } r < R \\ \phi_A(r) & \text{für } r \geq R \end{cases} \quad (2.37)$$

Das Gravitationspotenzial der Erde ist in Abbildung 2.24 dargestellt: mit $M = 5.978 \cdot 10^{24} \text{ kg}$ der Erdmasse, $G = 6.67428 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3/\text{kg s}^2$ der Gravitationskonstanten und dem Erdradius $R = 6,37 \cdot 10^3 \text{ m}$ [Halliday, 2013]. Das Potenzial nimmt im Erdmittelpunkt einen endlichen Wert an. Es handelt sich um ein Potenzialminimum, bei dem ein Probekörper den kleinsten energetischen Zustand einnimmt, den es bezüglich der Erdmasse haben kann. Das Potenzial nimmt mit zunehmenden Abstand r vom Mittelpunkt zu. Es ist zu erkennen, dass ab dem Kugelradius ein Wendepunkt in der Funktion ist und die Steigung des Potenzials mit weiterer Zunahme des Abstandes $r > R$ abflacht. Dies ist darauf zurückzuführen, dass ab $r = R$ keine feld-erzeugenden Massen vorhanden sind.

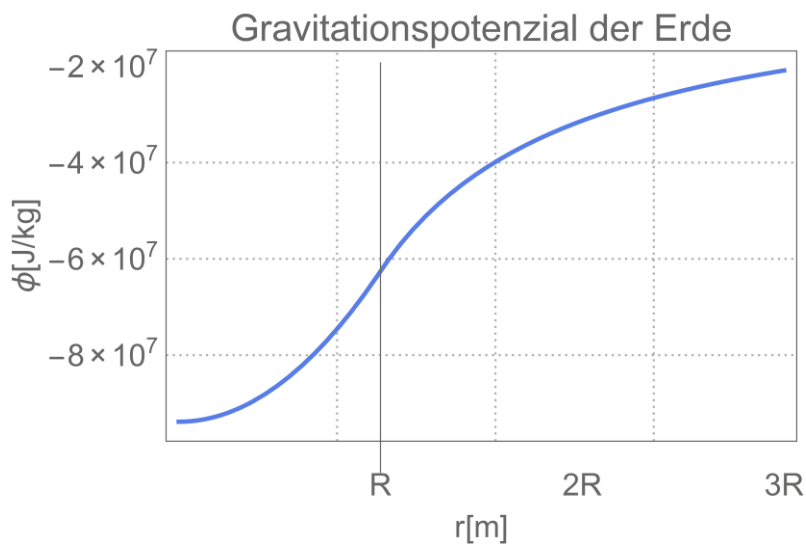


Abbildung 2.24: Gravitationspotenzial der Erde. Das Potenzial besitzt im Erdmittelpunkt bei $r = 0$ ein Potenzialminimum. Das Potenzial nimmt mit dem Abstand $|\vec{r}|$ zum Mittelpunkt zu. Ab $|\vec{r}| = R$ wird die Zunahme des Potenzials auf Grund der nicht mehr vorhandenen Masse kleiner.

Wird das Potenzial mit der Masse eines Körpers multipliziert, erhält man seine potenzielle Energie $V(\vec{r})$ bezüglich der Raumkoordinate:

$$V(\vec{r}) = m \cdot \phi(\vec{r}). \quad (2.38)$$

Aus dem Gravitationspotenzial lässt sich auch die Fallbeschleunigung nahe der Erdoberfläche ableiten. Dazu wird die räumliche Ableitung des Gravitationspotenzial gebildet:

$$g_A(\vec{r}) = -\text{grad } \phi_A = -\frac{G \cdot M}{r^2}. \quad (2.39)$$

Werden für G und M die oben genannten Werte und für r der Erdradius R eingesetzt, ergibt sich die gebräuchliche Gravitationsbeschleunigung nahe der Erdoberfläche mit $g = 9,81 \text{ m/s}^2$. Letztere wird meist für einfache Modellrechnungen nahe der Erdoberfläche genutzt und ist für die meisten Anwendungen ausreichend genau. Die exakte Gravitationsbeschleunigung ist in Wirklichkeit eine Funktion des Ortes und der Massenverteilung des betrachteten Körpers.

2.5.2 Grundsätzliches zum harmonischen Potenzial

Das harmonische Potenzial ist ein weiteres gebräuchliches Potenzial und beschreibt die potenzielle Energie einer Feder in abhängig seiner Auslenkung aus ihrer Ruhelage. Es handelt sich bei diesem Potenzial, wie auch bei den bereits erwähnten Potenzialen, um eine skalare Funktion: jedem Ort ist eine feste potenzielle Energie zugeordnet. Das Potenzial lässt sich aus der Federkennlinie beziehungsweise aus dem Hookeschen Gesetz herleiten. Eine einfache Schraubenfeder ist in Abbildung 2.25 zusammen mit der Federkennlinie dargestellt.

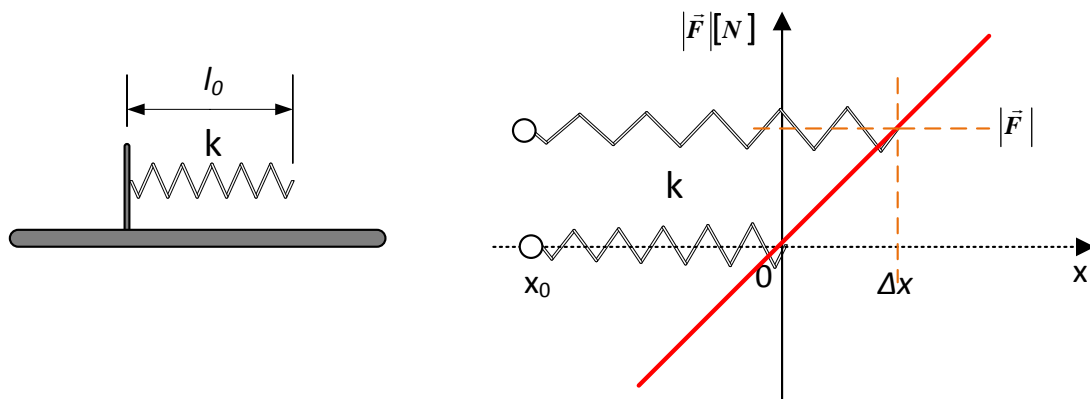


Abbildung 2.25: Federkennlinie einer linearen Schraubenfeder. l_0 beschreibt die Länge der entspannten Länge der Feder. Das rechte Diagramm zeigt den Zusammenhang zwischen der Kraft F und der Auslenkung x der Feder aus ihrer Ruhelage. An dem Punkt P_0 ist die Feder fixiert.

Es wird angenommen, dass die Federkraft $|\vec{F}|$ proportional zur Auslenkung Δx ist. Mit der Steifigkeit k gilt das Hooke'sche Gesetz:

$$F = |\vec{F}| = k \cdot \Delta x. \quad (2.40)$$

Die potenzielle Energie der Feder entspricht der Arbeit, die der Feder zugeführt wurde. Die Arbeit ist das Integral über die Auslenkung:

$$W = \int_0^{\Delta x} F \cdot \Delta x. \quad (2.41)$$

Angewendet auf das Hooke'sche Gesetz ergibt sich für das harmonische Potenzial einer Feder:

$$U(\Delta x) = \int_0^{\Delta x} k \cdot dx = \frac{1}{2} k \cdot \Delta x^2. \quad (2.42)$$

Die potenzielle Energie einer linearen Feder nimmt mit dem Quadrat der Auslenkung zu. Um den Ausdruck in eine allgemeingültige Form zu bringen, wird Δx durch die Beziehung $\Delta x = x - l_0$ ersetzt. Es ergibt sich:

$$U(x) = \frac{1}{2} k \cdot (x - l_0)^2. \quad (2.43)$$

Außerdem muss die Ortskoordinate des Punktes x_0 , an dem das Ende der Feder fixiert ist, berücksichtigt werden. Dazu wird für x die Verschiebung in x-Richtung eingesetzt:

$$U(x) = \frac{1}{2} k \cdot ((x - x_0) - l_0)^2. \quad (2.44)$$

Für die Berechnung eines mehrdimensionalen Systems wird x durch einen allgemeinen Raumvektor \vec{r} und die Ortskoordinate x_0 durch den Ortsvektor \vec{r}_0 ersetzt. Es ergibt sich:

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} k \cdot (|\vec{r} - \vec{r}_0| - l_0)^2. \quad (2.45)$$

Bei bekanntem Potenzial kann die Kraft bezüglich eines Ortes durch Bildung des negativen Gradienten des Potenzials, berechnet werden:

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) = -k \cdot (|\vec{r} - \vec{r}_0| - l_0) \cdot \widehat{\vec{r} - \vec{r}_0} \quad (2.46)$$

Dabei ist $\widehat{\vec{r} - \vec{r}_0} = \frac{\vec{r} - \vec{r}_0}{|\vec{r} - \vec{r}_0|}$ der Einheitsvektor. Er gibt die Richtung der Kraft \vec{F} in dem Ort \vec{r} an. Für die Berechnung eines Systems aus mehreren Federn ergibt sich das Gesamtpotenzial aus der Superposition der Einzelpotenziale zu:

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N k_i \cdot (|\vec{r} - \vec{r}_{0i}| - l_{0i})^2. \quad (2.47)$$

Darin ist N die Anzahl der Einzelpotenziale. Analog zum Potenzial kann das Kraftfeld ebenfalls durch Superposition der Einzelfelder berechnet werden. Es gilt für den Kraftvektor:

$$\vec{F}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}U(\vec{r}) = - \sum_{i=1}^N k_i \cdot (|\vec{r} - \vec{r}_{0i}| - l_{0i}) \cdot \widehat{\vec{r} - \vec{r}_{0i}}. \quad (2.48)$$

Als Beispiel sei das Potenzial einer Feder in der xy -Ebene berechnet. Die entspannte Federlänge l_1 ist null und die Federsteifigkeit k_1 wird mit eins festgelegt. Der Ortsvektor \vec{r}_1 , welcher das fixierte Ende der Feder beschreibt, wird in den Ursprung des Koordinatensystems gelegt.

Die Gleichung für die potenzielle Energie der Feder bezüglich der Raumkoordinaten x und y lautet:

$$U(x, y) = \frac{1}{2} k_1 \cdot (\sqrt{(x - x_{01})^2 + (y - y_{01})^2} - l_{01})^2. \quad (2.49)$$

Für die Kraftvektoren gilt:

$$\begin{aligned}\vec{F}(x, y) &= \begin{pmatrix} F_x(xy) \\ F_y(xy) \end{pmatrix} \\ &= k_1 \cdot \left(\sqrt{(x - x_{01})^2 + (y - y_{01})^2} - l_{01} \right) \cdot \begin{pmatrix} \frac{x - x_{01}}{\sqrt{(x - x_{01})^2 + (y - y_{01})^2}} \\ \frac{y - y_{01}}{\sqrt{(x - x_{01})^2 + (y - y_{01})^2}} \end{pmatrix} \quad (2.50)\end{aligned}$$

Das Potenzial des Federsystems ist in der Abbildung 2.26 dargestellt. Die linke Abbildung zeigt das Potenzial in der xy -Ebene als Konturdiagramm zusammen mit den Kraftvektoren. Die Länge der Kraftvektoren geben die Richtung der Kräfte im Raum an. Sie zeigen in Richtung des Ortes der minimalen potenziellen Energie beziehungsweise in Richtung des steilsten Abstiegs der Potenzialfunktion. Nicht berücksichtigt ist dabei der Betrag der Kraft. Das Potenzial ist durch die Temperaturskalar von blau bis rot kenntlich gemacht. Blau bedeutet, dass die potenzielle Energie minimal ist. Rot markiert die maximale abgebildete Energie. In der rechten Abbildung ist das identische Potenzial als 3D-Potenzialdiagramm dargestellt. Die Höhe gibt hier die potenzielle Energie in Nm bzw. *Joule* an. Dies ist eine besonders anschauliche Darstellungsform, da sofort die Orte maximaler und minimaler potenzieller Energie zu sehen sind. Die „Höhenlinien“ sind Linien gleicher potenzieller Energie oder Äquipotenziallinien. Bei der Verschiebung einer Masse entlang einer Äquipotenziallinien ändert sich die potenzielle Energie nicht. Das Potenzialfeld ist gleichsam einer Vorschau zu sehen, welche Energie oder Kräfte auf ein Objekt wirken, wenn es sich an

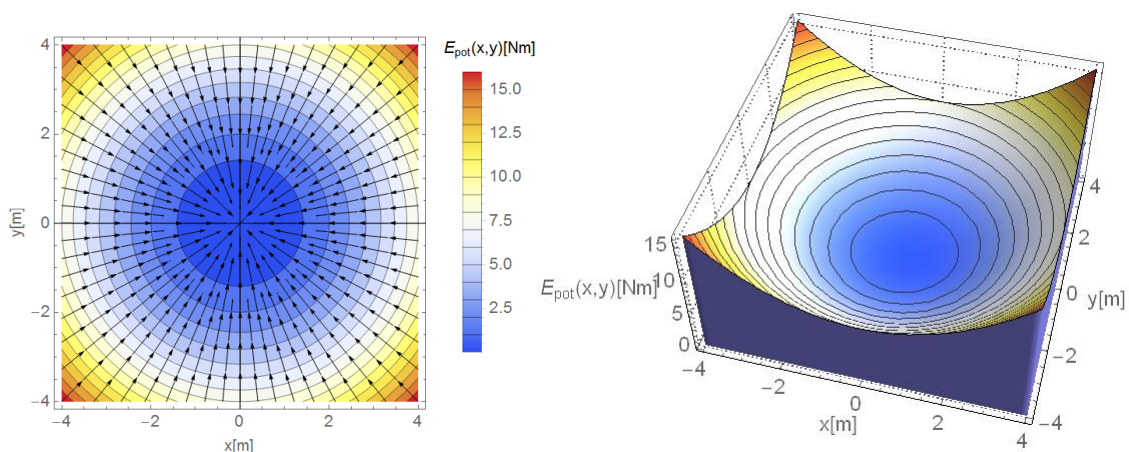


Abbildung 2.26: Harmonisches Potenzial eines Federsystems mit einer entspannten „Federlänge“ $l_1 = 0$.

einem bestimmten Ort befindet. Wird das Ende der Feder an ein Ort bewegt, wirken die Kräfte, die durch das Potenzial an diesem Ort bestimmt werden können. Daher treten Kräfte und potenzielle Energien erst dann auf, wenn der Zustand erzeugt wird. Vorher ist das Potenzial beziehungsweise das Kraftfeld nur eine Landkarte der möglichen Zustandsänderung, die das System einnehmen kann. In dem hier betrachteten Beispiel ist dies der Zustand der Feder. Das Potenzial der Feder gibt die möglichen Zustände an, in denen sich die Feder befinden kann.

2.5.3 Berechnung von Systemzuständen und Prozessabläufen im harmonischen Potenzial mit Hilfe des Lagrange'schen Formalismus

Der Lagrange-Formalismus ist eine Methode, der theoretischen Physik, um dynamische Systeme durch eine einzige skalare Funktion beschreiben zu können. Im Gegensatz zur Newton'schen Mechanik lassen sich mit dem Lagrange-Formalismus auch Systeme in beschleunigten Bezugssystemen lösen. Es können Zwangskräfte, die erst durch eine beschleunigte Bewegung entstehen, explizit berechnet werden. Die Zwangskräfte entstehen durch die Einschränkung einer Bewegung. Diese Einschränkungen werden durch Zwangsbedingungen formuliert. Eine solche Zwangsbedingung ist zum Beispiel die Bahnkurve eines Pendels. Durch den Faden wird die Bewegung der Masse auf eine Kreisbahn um den Aufhängepunkt gehalten. So kann auch der Wagen einer Achterbahn sich nur entlang der Schienen bewegen. Sind diese Beziehungen bekannt, können die Bewegungsgleichungen des Systems mit den **Euler-Lagrange-Gleichungen** bestimmen werden. Dabei gilt das Hamilton'sche Prinzip oder auch Prinzip der kleinsten Wirkung genannt. Das bedeutet, dass ein System den kleinsten oder größtmöglichen Wert annimmt. Für die potenzielle Energie eines Systems heißt das, dass es den Zustand der kleinsten potenziellen Energie einnimmt.

Für ein System mit bekanntem Potenzial und holonomen Zwangsbedingungen gilt die Lagrange'sche-Funktion nach **[Rebhan, 2006]**:

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = T(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) - U(\vec{r}, t), \quad (2.51)$$

wobei $U(\vec{r}, t)$ die potenzielle Energie und $T(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t)$ die kinetische Energie des betrachteten Systems beschreiben. Holonome Zwangsbedingungen bedeuten, dass sich die Zwangsbedingungen durch die Koordinaten (hier x, y) beschreiben lassen. Die Koordinaten werden hier mit dem Raumvektor \vec{r} beschrieben. Für die folgenden Berechnungen wird das kartesische Koordinatensystem verwendet, wobei der Raumvektor \vec{r} die xyz -Komponenten entspricht.

Es werden bei den Lagrange'schen Gleichungen zwischen der ersten und zweiten Art unterschieden. Bei der Lagrange'schen Gleichung ersten Art werden die Zwangskräfte explizit ausgerechnet. Die Lagrange'sche-Gleichung der zweiten Art verzichtet auf die explizite Berechnung der Zwangskräfte. Die Zwangskräfte werden aus der Bewegungsgleichung eliminiert. Die Berechnungen in dieser Arbeit werden stets mit der Lagrange'schen Gleichung zweiter Art durchgeführt. Sind die Größen in der Lagrange-Funktion (2.51) bekannt, kann mit dem Lagrange'schen Formalismus die Bewegungsgleichung berechnet werden **[Rebhan, 2006]**:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}} \right) - \frac{\partial L}{\partial \vec{r}} = 0. \quad (2.52)$$

Dabei sind $\frac{\partial L}{\partial \vec{r}}$ die Ableitung der Lagrange'schen-Funktion nach den Ortskoordinaten und $\frac{\partial L}{\partial \dot{\vec{r}}}$ die Ableitung nach den Geschwindigkeiten. Diese wird ein weiteres Mal nach der Zeit abgeleitet und ergibt so mit der Einheit einer Kraft. Die Differenzialgleichung beschreibt das Kräftegleichgewicht des Systems.

Ein einfaches Feder-Masse-System bietet sich zur Erläuterung des Lagrange-Formalismus an. Das Feder-Masse-System ist in Abbildung 2.27 dargestellt. Es handelt sich um den mechanischen Aufbau eines Systems, bei dem die Federlänge l_0 „quasi“ null ist. Das wird technisch dadurch erreicht, dass eine einfache Spiralfeder unterhalb einer Platte mit einer Bohrung angebracht wird. An das Ende der Feder wird ein Faden befestigt, welcher im entspannten Zustand der Feder genau über der

Bohrung endet und mit einer Masse m verbunden ist. Die Bewegung der Masse wird auf die xy -Ebene eingeschränkt. Die Parameter des Systems werden so festgelegt, dass die Eigenfrequenz f_0 des Systems wiederum 1 Hz beträgt. Die Masse m wird mit 1 kg festgesetzt. Die Eigenkreisfrequenz eines Feder-Masse-System nach **[Redlich, 2011]** ist:

$$\omega_0 = 2 \cdot \pi \cdot f_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (2.53)$$

Durch Umstellen der Gleichung lässt sich die Federsteifigkeit berechnen. Sie beträgt $4\pi^2 \frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$. Es wird angenommen, dass das System reibungsfrei ist.

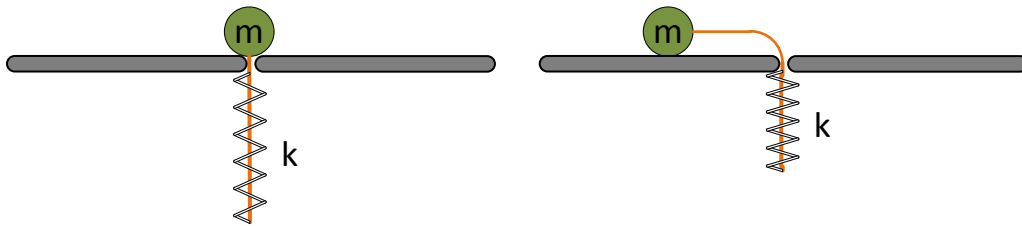


Abbildung 2.27: Mechanischer Aufbau eines Feder-Masse-Systems mit einer entspannten Federlänge $l_o = 0$.

Die potenzielle Energie des Systems ist

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} k \cdot (|\vec{r}| - l_o)^2 = \frac{1}{2} k \cdot (\sqrt{x^2 + y^2} - l_o)^2, \quad (2.54)$$

wobei die Länge l_o in dem obigen Aufbau null ist. Für diesen Fall gilt vereinfacht:

$$U(\vec{r}) = \frac{1}{2} k \cdot |\vec{r}|^2 = \frac{1}{2} k \cdot (x^2 + y^2). \quad (2.55)$$

Die kinetische Energie des Systems ist:

$$T(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \frac{1}{2} m \cdot |\dot{\vec{r}}|^2 = \frac{1}{2} m \cdot (\dot{x}^2 + \dot{y}^2). \quad (2.56)$$

Daraus folgt für die Lagrange-Gleichung:

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = T - U = \frac{1}{2}m \cdot (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - \frac{1}{2}k \cdot (x^2 + y^2). \quad (2.57)$$

Die Bewegungsfunktionen, die sich durch Anwendung des oben genannten Formalismus ergeben, sind:

$$\begin{aligned} k \cdot x(t) + m \cdot \ddot{x}(t) &= 0 \\ k \cdot y(t) + m \cdot \ddot{y}(t) &= 0 \end{aligned} \quad (2.58)$$

Es handelt sich dabei um zwei nicht-gekoppelte Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Mit einer geeigneten Ansatzfunktion lässt sich für diese Gleichungen die analytische Lösung finden:

$$\vec{r}(t) = \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{x} \cos(\omega_0 \cdot t) \\ \hat{y} \cos(\omega_0 \cdot t) \end{pmatrix}. \quad (2.59)$$

worin \hat{x} und \hat{y} die maximale Auslenkungen des Systems in x - und y -Richtung sind. Es handelt sich um den harmonischen Oszillator. Existiert für ein System keine analytische Lösung, muss die Differentialgleichung mit einem numerischen Verfahren gelöst werden. In der vorliegenden Arbeit wurden die Berechnungen mit dem Programm Wolfram Mathematica Version 10.2 durchgeführt. Für das oben aufgeführte Beispiel ergibt sich mit den Randbedingungen für die Anfangsgeschwindigkeiten:

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_0 \\ \dot{y}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \left[\frac{m}{s} \right], \quad (2.60)$$

und mit den Anfangsauslenkungen x_0 und y_0 beziehungsweise die Maximalauslenkungen \hat{x} und \hat{y} :

$$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} [m] \quad (2.61)$$

und der Bewegungsverlauf über der Zeit nach Abbildung 2.28. Da die Auslenkung und die Anfangsgeschwindigkeiten in y mit null angenommen wurden, reicht die Betrachtung in x -Richtung aus. In der Abbildung sind die analytische und die numeri-

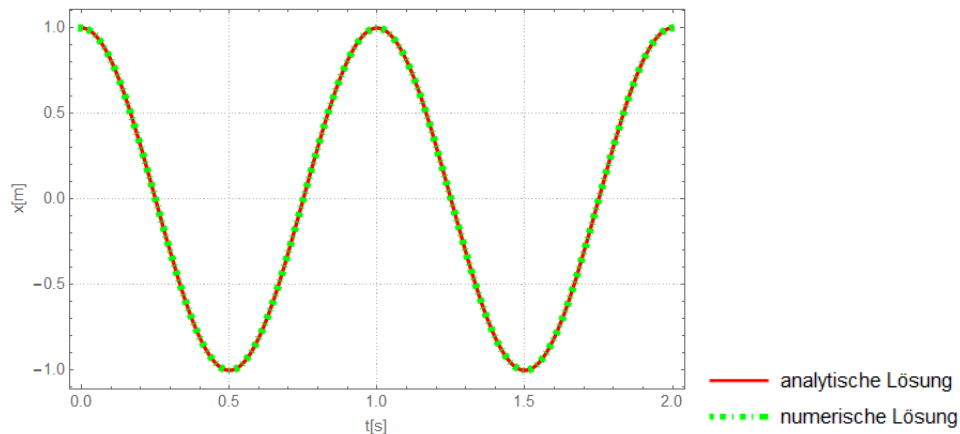


Abbildung 2.28: Bewegungverlauf über der Zeit des Feder-Masse-Systems in x-Richtung.

sche Lösung dargestellt. Erwartungsgemäß zeigt sich bei dieser Plausibilitätsbetrachtung die Deckungsgleichheit.

In der Abbildung 2.29 ist der Bewegungverlauf als rote Linie im Potenzial dargestellt. Die dargestellte „Höhenänderung“ (z-Richtung) beschreibt die Änderung der potenziellen Energie in Abhängigkeit von der Position der Masse. Sie ist nicht mit der Verschiebung der Masse in die Raumrichtung von z-Richtung zu verwechseln.

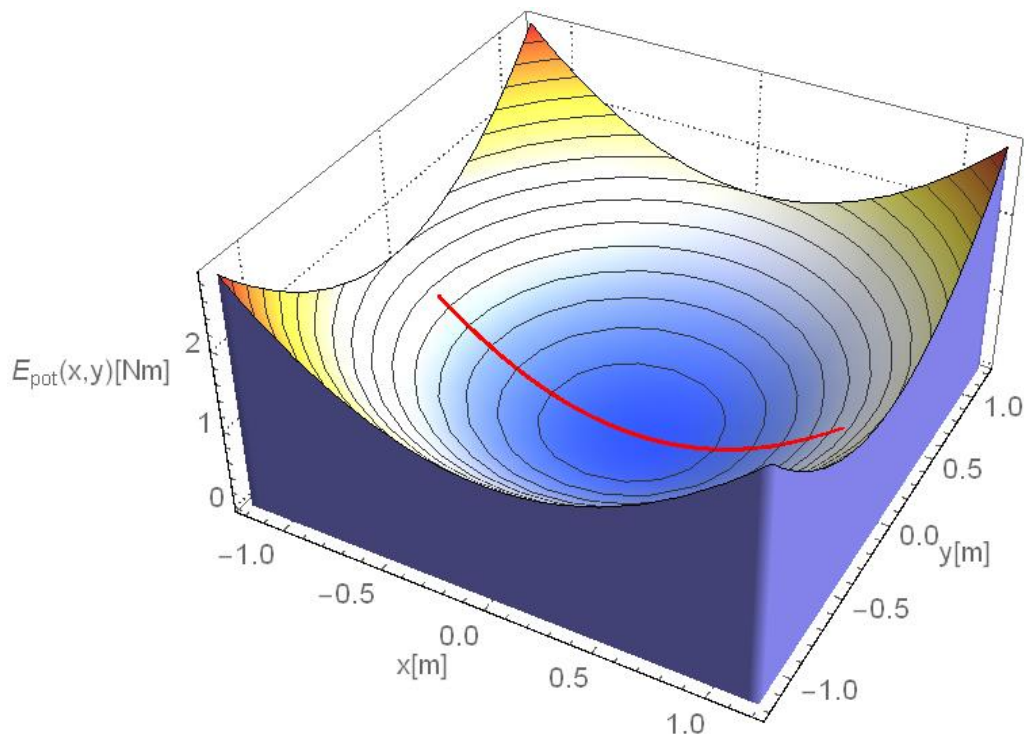


Abbildung 2.29: Dreidimensionaler Bewegungsverlauf des Feder-Masse-Systems im Potenzialfeld, hier in der "der Form" der potenziellen Energie.

Wird bei den Anfangsgeschwindigkeiten die y -Komponente auf 2 m/s gesetzt:

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_0 \\ \dot{y}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \left[\frac{\text{m}}{\text{s}} \right], \quad (2.62)$$

beschreibt die Bewegung der Masse in der xy -Ebene eine Ellipse um die Ruhelage. Die Trajektorie der Masse ändert sich, sobald die Anfangsgeschwindigkeit in y -Richtung geändert wird (siehe Abbildung 2.30).

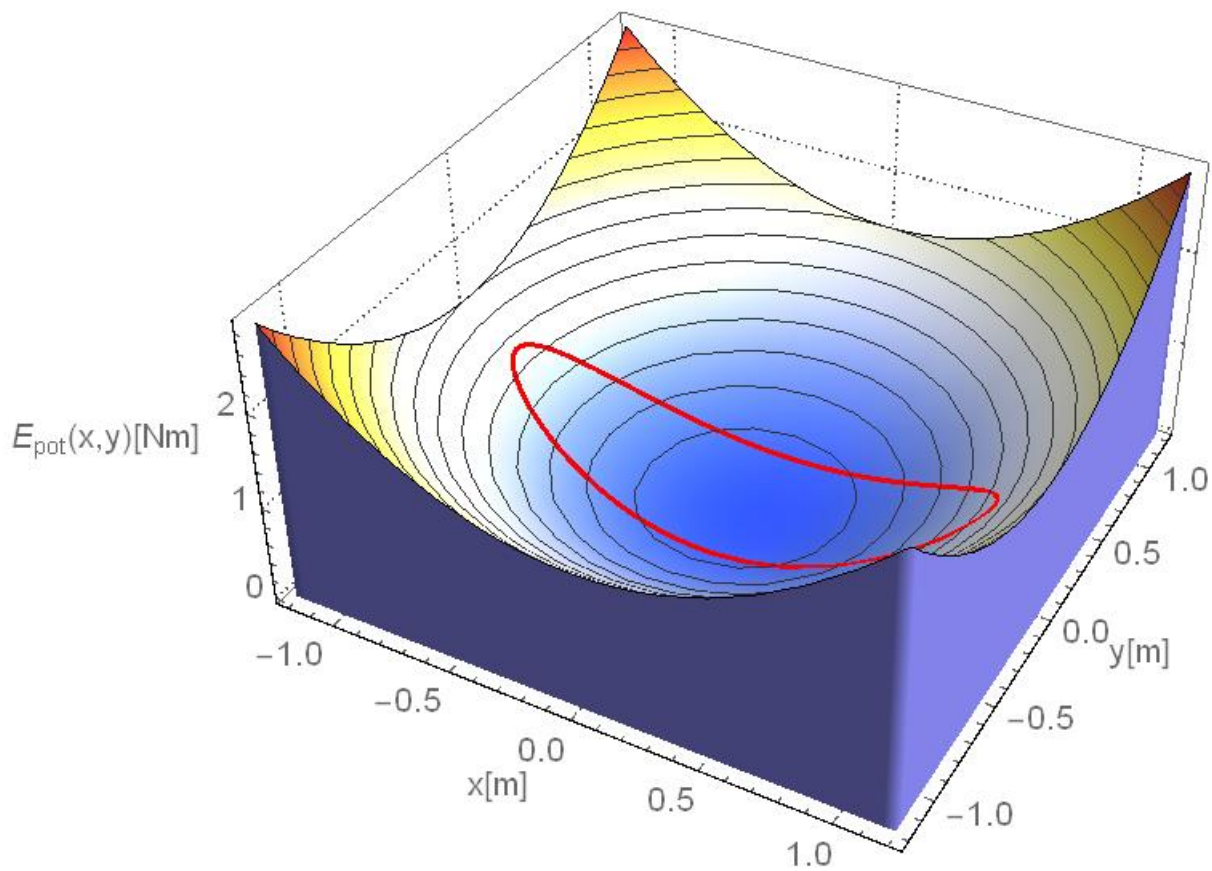


Abbildung 2.30: Dreidimensionaler Bewegungsverlauf des Feder-Masse-Systems mit einer zusätzlichen Anfangsgeschwindigkeit in y -Richtung.

2.6 Potenziale von Atombindungen

Um die Eigenschaften von Atombindungen zu beschreiben, gibt es eine Fülle von Möglichkeiten. Jede dieser Beschreibungen hat ihre Vor- und Nachteile. Dabei ist die Wahl des Modells wesentlich davon abhängig, welche Voraussagen mit einer Berechnung oder Simulation gemacht werden sollen und welche physikalischen Eigenschaften betrachtet werden.

In der vorliegenden Arbeit geht es auch um die Frage, wie sich Teilchen oder Atome im Raum anordnen. Topologien, Muster und Strukturen können als Zielfunktion angesehen werden. Das Ziel ist, zu verstehen, wie sich die Teilchen aufgrund ihrer Potentiale selbstorganisiert zueinander anordnen. Thermische, elektrische oder optische Eigenschaften des Systems werden zunächst vernachlässigt.

Die Grundlage der chemischen Bindungen sind die elektrostatischen Wechselwirkungen zwischen den Atomen. Sie bilden die Grundlage dafür, dass sich Moleküle und damit chemische Bindungen zwischen Atomen ausbilden. Damit lassen sich die strukturelle Anordnung wie auch mechanischen Eigenschaften eines Materials erklären. Über die Bindungskräfte bzw. Bindungsenergien können Aussagen über die Belastbarkeit von Materialien getroffen werden. Durch die Art der Bindungen und deren räumliche Ausrichtung können Informationen über deren Anordnung gewonnen werden. Daher liegt es nahe, für die Simulation ein Modell für die atomaren Bindungen zu wählen. Je nach Bindungsart gibt es eine Vielzahl an verschiedenen Modellen. In dieser Arbeit wird das Lennard-Jones-Potenzial für die Simulation von Festkörpersystemen favorisiert.

2.6.1 Zum Lennard-Jones-Potenzial

Das Lennard-Jones Potenzial beschreibt näherungsweise die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei Atomen oder Molekülen, bei gleichzeitig präsenten Anziehungs- und Abstoßungskräften. Es handelt sich dabei um die anziehenden van-der-Waals-Kräfte oder permanente Dipol-Dipol-Wechselwirkungen zwischen den Atomen oder Molekülen. Das Lennard-Jones Potenzial besteht aus einem anziehenden und aus einem abstoßenden Bereich, welche durch ihre Überlagerung ein Potenzialminimum ausbilden, bei dem sich die anziehenden und die abstoßenden Kräfte gegen-

seitig aufheben. Der abstoßende Bereich verhindert, dass sich die Atome oder Moleküle nicht durchdringen können. Der anziehende Teil ist für die Bindung zwischen den Atomen zuständig.

Das Lennard-Jones-Potenzial lässt sich mathematisch nach [Weissmentel, 1995] wie folgt schreiben:

$$U(r) = \underbrace{-\frac{\alpha}{r^m}}_{\text{anziehend}} + \underbrace{\frac{\beta}{r^n}}_{\text{abstoßend}} . \quad (2.63)$$

Dabei ist r der Abstand zwischen den Teilchen. Die Exponenten m und n geben an, wie schnell der abstoßende beziehungsweise der anziehende Teil abnehmen, wobei m der Exponent für die anziehende, und n der Exponent für die abstoßenden Energie ist. Erfahrungsgemäß sollte stets $n > m$ sein. Aus praktischen Gründen werden für die Exponenten $m = 6$ und $n = 12$ gewählt. Diese Form wird häufig als „Lennard-Jones-12,6-Potenzial“ bezeichnet.

Die Koeffizienten α und β geben stoffspezifische Eigenschaften an, die zum Beispiel mit der Ionisierungsenergie oder den Bindungsenergien der beteiligten Komponenten zusammenhängen. Das Lennard-Jones-Potenzial ist in Abbildung 2.31 dargestellt. Auf der y -Achse ist die potenzielle Energie aufgetragen. Die x -Achse gibt den Abstand zwischen den Teilchen an. Die rot dargestellte Kurve beschreibt das Lennard-Jones-Potenzial, das sich aus der Überlagerung der abstoßenden und der anziehenden Energien ergibt. Die blaue Kurve beschreibt den abstoßenden Term, die grüne Kurve den anziehenden Term. Das Potenzial besitzt bei $r = r_0$ ein Minimum, bei dem die potenzielle Energie $U(r_0)$ den minimalen Wert U_0 besitzt. Dies ist der Abstand, den zwei Teilchen einnehmen, wenn die Teilchen keine kinetische Energie bzw. Wärme besitzen. Es beschreibt also den „statischen“ Zustand, den die Teilchen einnehmen würden. Die potenzielle Energie, die dann vorherrscht, hat den kleinstmöglichen Energiewert, den das System einnehmen kann und beschreibt den statischen Gleichgewichtszustand. Es handelt sich hierbei um die Bindungsenergie U_0 .

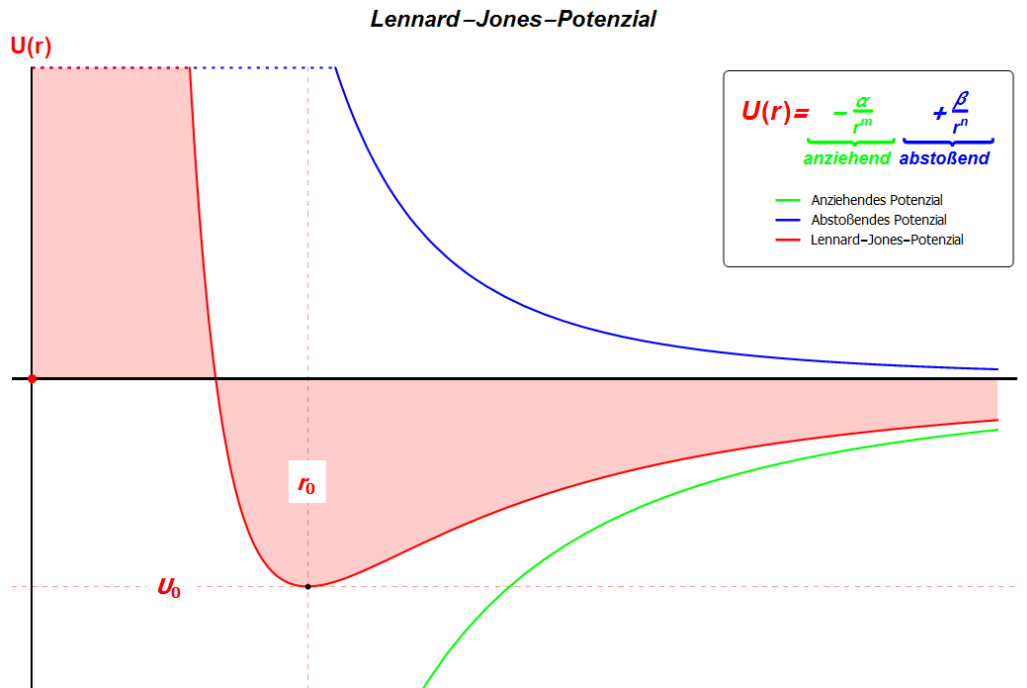


Abbildung 2.31: Lennard-Jones-Potenzial mit abstoßenden und anziehenden Term. Es zeigt den ortsabhängigen Verlauf der Energie, welche zwischen zwei Teilchen bezüglich ihres Abstandes r herrscht.

Wie zuvor bereits erwähnt, lassen sich aus dem Potenzial die wirkenden Kräfte berechnen. Sie ergeben sich durch die Bildung des negativen Gradienten $-\vec{\nabla}U(\vec{r})$ des Potenzials $U(\vec{r})$:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U(\vec{r}). \quad (2.64)$$

Das Potenzial, der Gradient sowie der negative Gradient sind in Abbildung 2.32 dargestellt. An dem negativen Gradienten (blaue Kurve) lassen sich einige wichtige Merkmale ablesen. So beschreibt dessen Nullstelle den Ort des Potenzialminimums, an dem die abstoßenden und anziehenden Kräfte sich gegenseitig aufheben. Ist der Abstand der Teilchen kleiner als der Abstand r_0 , ist die Kraft positiv. Das bedeutet: die Teilchen stoßen sich gegenseitig ab. Ist der Abstand der Teilchen hingegen größer als r_0 , ist die Kraft negativ und die Teilchen ziehen sich gegenseitig an. Ein weiterer wichtiger Ort ist der, an dem die Kraft sein Maximum hat. Dieser befindet sich bei dem Abstand r_w und beschreibt den Wendepunkt des Potenzials, an dem die Steigung der potenziellen Energie abnimmt. Dies gilt auch für die anziehenden Kräfte. Werden die Teilchen durch eine größere äußere Kraft beaufschlagt, führt dies zur Trennung der Teilchen [Föll, 2015]. Diese Kraft wird benötigt, um die Bindung zwischen den Teilchen zu lösen.

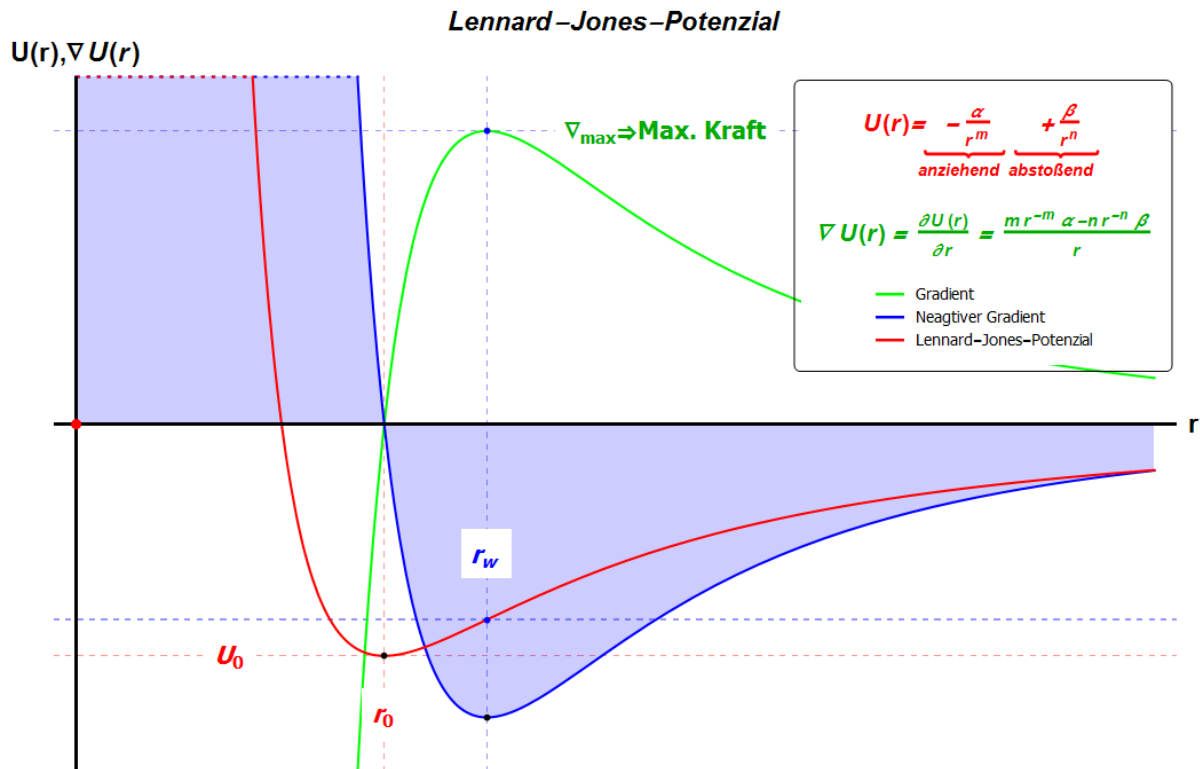


Abbildung 2.32: Lennard-Jones-Potenzial mit dem Gradienten und negativen Gradienten des Potentials. Es zeigt den Verlauf der Energie, welche zwischen zwei Teilchen bezüglich ihres Abstandes r herrscht. Die Gradienten geben die lageabhängige Kraft an.

Der Gradient des Potentials nach Gleichung (2.63) ist:

$$\vec{\nabla} U(r) \equiv \frac{\partial U(r)}{\partial r} = \frac{\alpha \cdot m \cdot r^{-m} - \beta \cdot n \cdot r^{-n}}{r}. \quad (2.65)$$

Der Bindungsabstand r_0 ergibt sich durch Nullsetzen des Gradienten zu:

$$r_0 = e^{\frac{\log(m) - \log(n) + \log(\alpha) - \log \beta}{m-n}} = \left(\frac{n \cdot \beta}{m \cdot \alpha} \right)^{\frac{1}{n-m}}. \quad (2.66)$$

Aus diesem Bindungsabstand lässt sich durch Einsetzen in die Potenzialgleichung die minimale potenzielle Energie berechnen:

$$U_0 = U(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0^m} + \frac{\beta}{r_0^n} = -\alpha \left(\frac{n \cdot \beta}{m \cdot \alpha} \right)^{\frac{n-m}{m}} + \beta \left(\frac{n \cdot \beta}{m \cdot \alpha} \right)^{\frac{n-m}{m}}. \quad (2.67)$$

Der Wendepunkt r_w beziehungsweise der Ort der maximalen Kraft berechnet sich durch Nullsetzen der zweiten Ableitung des Potentials:

$$\vec{\nabla}^2 U(r) = \Delta U(r) \equiv \frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} = 0. \quad (2.68)$$

Daraus folgt für den Wendepunkt r_w :

$$r_w = \left| e^{\frac{i \cdot \pi + \log(-m \cdot \alpha - m^2 \cdot \alpha) - \log(n \cdot \beta + n^2 \cdot \beta)}{m - n}} \right|. \quad (2.69)$$

Der Betrag der Kraft ist dann

$$\vec{\nabla} U(r_w) = \frac{\alpha \cdot m \cdot r_w^{-m} - \beta \cdot n \cdot r_w^{-n}}{r_w}. \quad (2.70)$$

Für ein Mehrteilchensystem ergibt sich das Gesamtpotenzial durch Superposition der Einzelpotenziale zu:

$$U(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N U_i(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\alpha_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^m} + \frac{\beta_i}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^n} \right). \quad (2.71)$$

Dabei ist \vec{r} nun ein Vektor, der die Raumrichtungen des Systems angibt. Das Potenzial ist für den Fall einer zweidimensionalen Betrachtung in der xy -Ebene radialsymmetrisch. Für ein dreidimensionales System ist das Potenzial kugelsymmetrisch. Der Vektor \vec{r}_i gibt den Ort des i -ten Teilchen an und N ist die Anzahl der Teilchen. Wird die obige Summenformel des Potenzials auf ein ebenes System im kartesischen Koordinatensystem mit der xy -Ebene angewendet, ergibt sich das Potenzial:

$$U(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\alpha_i}{(\sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2})^m} + \frac{\beta_i}{(\sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2})^n} \right). \quad (2.72)$$

Der Gradient eines Systems in der xy -Ebene ist die partielle Ableitung nach den Raumrichtungen x und y :

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} \sum_{i=1}^N U_i(\vec{r}_i(x, y)) = \begin{pmatrix} \frac{\partial U}{\partial x} \\ \frac{\partial U}{\partial y} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N \left(\frac{m^2 \alpha (x - x_i)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{m/2+1}} - \frac{n^2 \beta (x - x_i)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{n/2+1}} \right) \\ \sum_{i=1}^N \left(\frac{m^2 \alpha (y - y_i)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{m/2+1}} - \frac{n^2 \beta (y - y_i)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{n/2+1}} \right) \end{pmatrix}. \quad (2.73)$$

Die beiden Gleichungen (2.72) und (2.73) bilden die Grundlage, für die nachfolgenden Simulationen. Durch ein geeignetes numerische Iterationsverfahren, welches in Kapitel 3.1.1 „Simulationsalgorithmen für das Lennard-Jones-Potenzial“ beschrieben wird, ordnen sich die Teilchen aufgrund ihrer Potenziale aus einem gegebenen Anfangszustand „potenzialbasiert“ an.

2.6.2 Eigenschaften des Lennard-Jones-Potenzials

Es lassen sich außer den bereits aufgeführten Merkmalen noch weitere Eigenschaften eines atomaren Systems mit der Beschreibung des Lennard-Jones-Potenzial erklären. So können zum Beispiel die Schwingungen der Atome, also die kinetische Energie der Atome, erklärt werden. Sind die Atome nicht vollständig in Ruhe, schwingen diese um den Gleichgewichtszustand r_0 . Die maximale kinetische Energie besitzt das Teilchen, wenn es den Abstand r_0 hat. Die potenzielle Energie ist dann minimal. Die maximale potenzielle Energie erreicht das Teilchen, wenn es bei r_{min} bzw. bei r_{max} ist. Dort ist die kinetische Energie null. Die Rückstellkräfte, welche das Teilchen um den Abstand r_0 schwingen lassen, werden durch den Gradienten beschrieben. Eine symbolische Darstellung dieser Schwingungen im Lennard-Jones-Potenzial ist in Abbildung 2.33 zu sehen. Dabei ist nicht jede beliebige Schwingung zulässig: Es sind nur solche möglich, die gemäß der Quantentheorie durch die Lösung der entsprechenden Schrödingergleichung erlaubt sind.

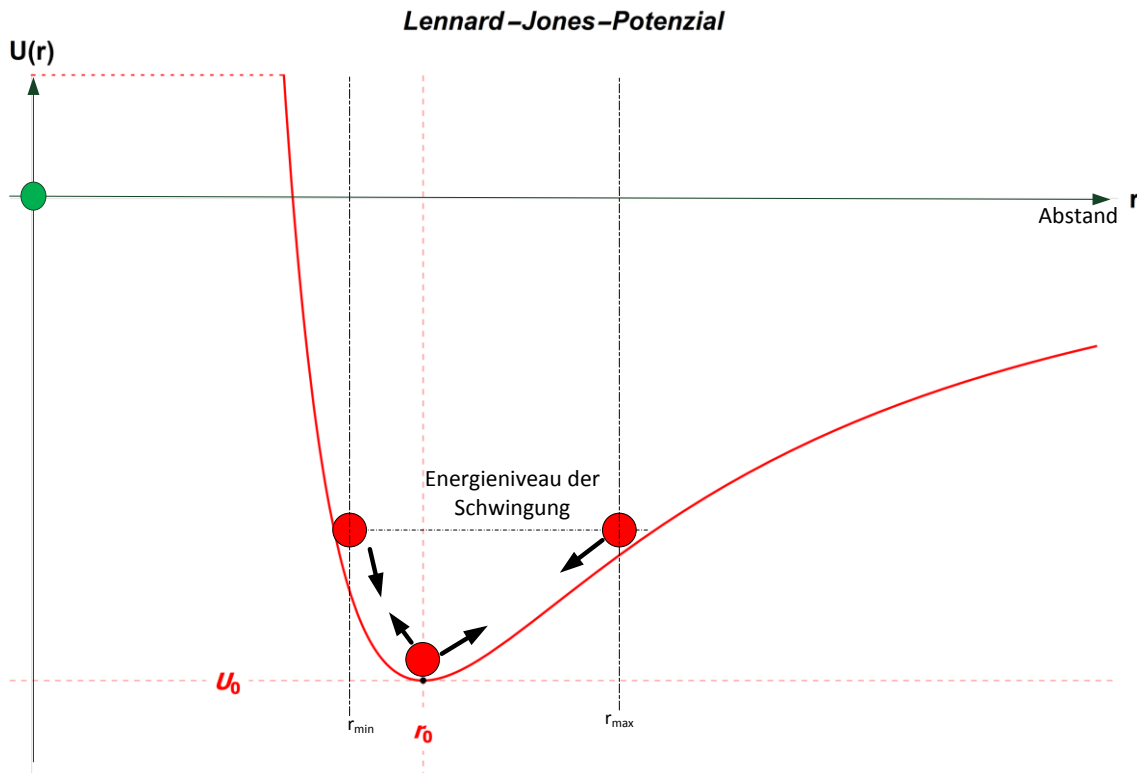


Abbildung 2.33: Teilchen die durch das Lennard-Jones-Potenzial wechselwirken, können nur diskrete Schwingungszustände einnehmen.

Anhand des Wendepunktes r_w lässt sich die ungefähre Schmelztemperatur eines Materials aus dem Potenzial bestimmen. Ist das Energieniveau der Schwingung größer als die potenzielle Energie am Wendepunkt r_w , können die Teilchen sich soweit voneinander entfernen, dass die Rückstellkraft nicht mehr ausreicht, um das Teilchen wieder in sein potenzielles Minimum zu bringen.

Auch die thermische Ausdehnung eines Materials lässt sich durch die Kenntnis des Potenzials herleiten. Mit Zunahme des Energieniveaus nimmt der mittlere Abstand zwischen den Teilchen zu. Dies zeigt die blaue Kurve in Abbildung 2.34.

Die Kenntnis des Bindungspotenzials erlaubt zudem die Bestimmung wesentlicher mechanischer Eigenschaften eines Materials. So lässt sich der E-Modul aus dem Potenzial herleiten, sowie die Bruchspannung und weitere materialspezifische Eigenschaften, [Föll, 2015].

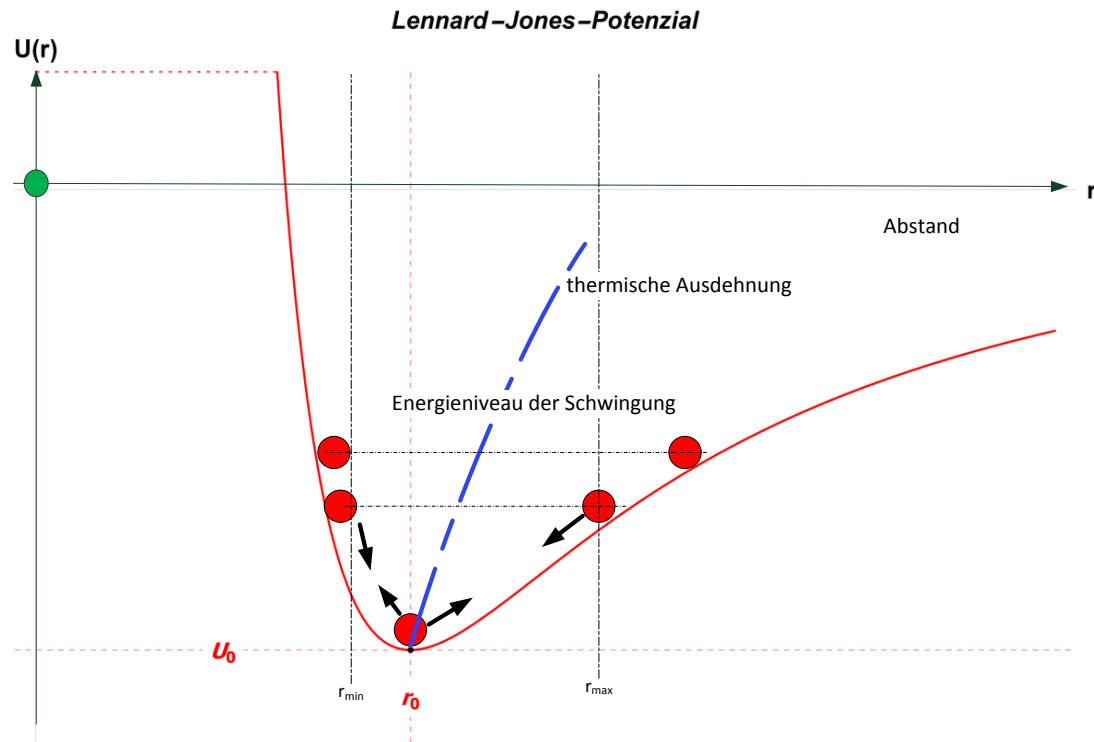


Abbildung 2.34: Zusammenhang der thermischen Ausdehnung eines Körpers, der durch die Schwingung der Teilchen um ihr potenzielles Minimum im Lennard-Jones-Potenzials, erklärt werden kann.

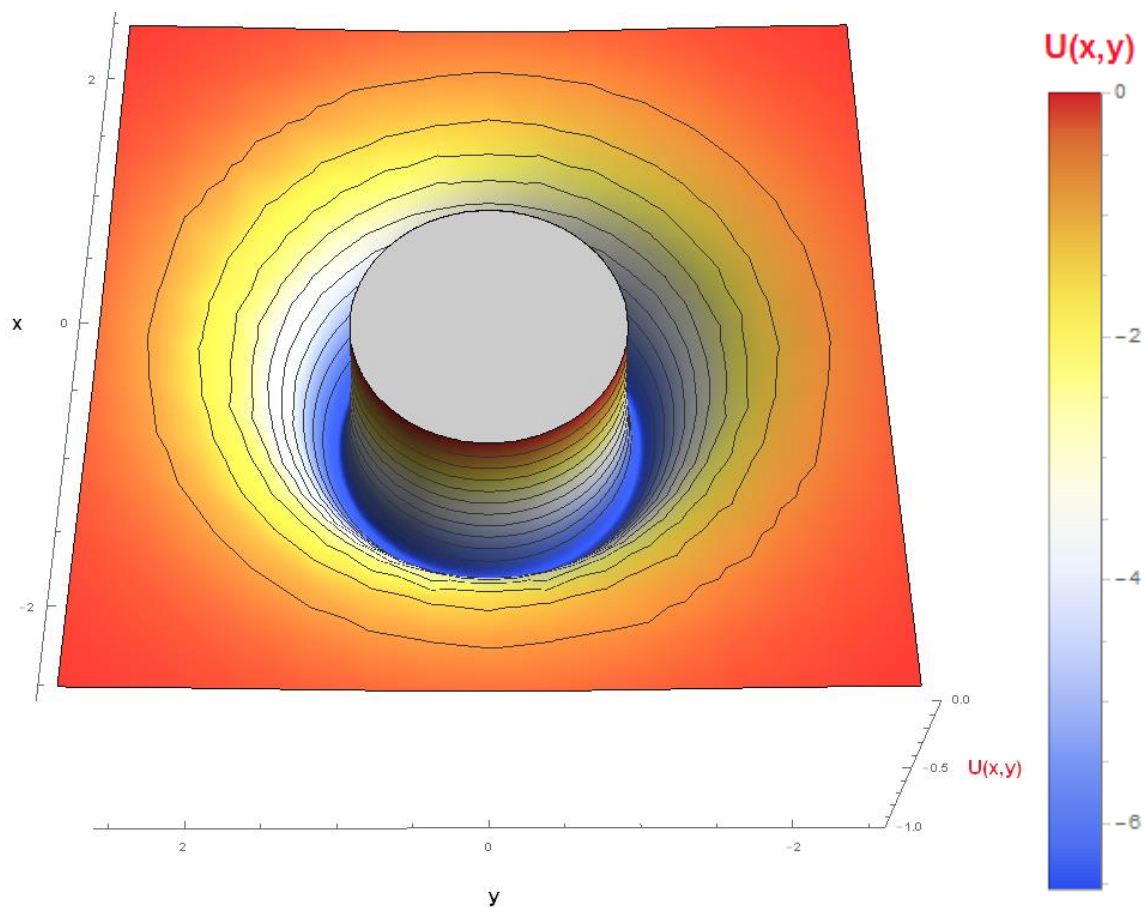


Abbildung 2.35: 3D-Potenzialdarstellung eines in der xy -Ebene wirkenden des Lennard-Jones-Potenzial.

3 Potenzialbasierte Modellierung selbstorganisierter Prozesse

*Modeling is the physicalization of a concept,
simulation is its computational realization.*

(S. Yip: "Synergistic Science", Nature Mater., 3, 1-3, 2003)

Selbstorganisierte Prozesse sind aus Sicht der Physik hochkomplexe Vorgänge. Um sie modellieren zu können, ist es erforderlich, die wesentlichen Einflussfaktoren zu berücksichtigen. Die Prinzipien und die Wechselwirkungen, die bei solchen Systemen beobachtet werden können, sind für eine Reihe von Prozessen immer noch nicht vollständig verstanden. In den nachfolgenden Unterkapiteln werden die Simulationmethoden und -algorithmen vorgestellt, die im Rahmen dieser Arbeit eingesetzt und entwickelt wurden.

3.1 Simulation potenzialbasierter Systeme

Um potenzialbasierte Prozesse zu simulieren, können die in den Grundlagenkapiteln beschriebenen Potenziale genutzt werden. Abhängig davon, welche physikalischen Sachverhalte abgebildet werden sollen, muss ein geeignetes physikalisches Modell zur Abbildung eines Systems ausgewählt werden. In dieser Arbeit liegt der Fokus auf der **Strukturbildung von Vielteilchensystemen**. Dafür eignen sich unter anderem das harmonische Potenzial und das Lennard-Jones-Potenzial. Das harmonische Potenzial ist vergleichsweise sehr einfach mathematisch zu beschreiben. Das Lennard-Jones-Potenzial ist dagegen in seiner mathematischen Struktur komplexer und erfordert daher einen größeren Rechenaufwand. Die Besonderheit des Lennard-Jones-Potenzials ist sein nichtlinearer Verlauf.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Simulationen sowohl mit dem harmonischen Potenzial als auch mit dem Lennard-Jones-Potenzial durchgeführt. Die Simulationen, welche mit dem harmonischen Potenzial gemacht wurden, sind einfache Schwingungssysteme. An ihnen soll gezeigt werden, wie die kinetischen und dissipativen Energien in den Simulationen berücksichtigt werden können. Dem gegenüber stehen die Simulationen mit dem Lennard-Jones-Potenzial, die keine kinetische und dissipative Energien berücksichtigen, dafür aber Systeme mit vielen Teilchen abbilden.

3.1.1 Simulationsalgorithmen für das Lennard-Jones-Potenzial

Im Rahmen dieser Arbeit wurden Simulationen für Vielteilchensysteme auf Basis des Lennard-Jones-Potenzials durchgeführt, um anziehende und abstoßende Kräfte zwischen den Teilchen gleichermaßen zu berücksichtigen. Die Simulationen berücksichtigen allerdings keine kinetischen und dissipativen Energien der Teilchen. Das realisierte Verfahren ist in der nachfolgend dargestellten Form quasistatisch. Aus den Simulationen lassen sich auch ohne Berücksichtigung der Dynamik wichtige Erkenntnisse der Strukturbildung bei selbstorganisierten Prozessen gewinnen.

Die Verschiebung eines Teilchen \vec{r}_j berechnet sich aus dem negativen Gradienten des Gesamtpotenzials aller anderen Teilchens \vec{r}_2 bis \vec{r}_N des Systems am Ort \vec{r}_j des betrachteten Teilchens multipliziert mit einem Schrittweitenvektor $\vec{\mu}$. Das Gesamtpotenzial entspricht der Überlagerung der Einzelpotenziale aller Teilchen, ohne jedoch das Potenzial des aktuellen Teilchens \vec{r}_j zu berücksichtigen in allgemeiner Vektorschreibweise lautet es:

$$U(\vec{r}_j) = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N U_i(\vec{r}_j) = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \left(-\frac{\alpha_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^{m_i}} + \frac{\beta_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^{n_i}} \right) \text{ mit } j \in [1, N]. \quad (3.1)$$

Die Berechnungsvorschrift zur Bildung des negativen Gradienten lautet:

$$\vec{\nabla}(\vec{r}_j) = -\vec{\nabla}U(\vec{r}_j) = -\vec{\nabla} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N U_i(\vec{r}_j) \text{ mit } j \in [1, N]. \quad (3.2)$$

Die Verschiebung eines Teilchens ergibt sich aus dem negativen Gradienten multipliziert mit dem Schrittweitenfaktor μ :

$$\Delta \vec{r}_j = -\vec{\nabla}U(\vec{r}_j) \cdot \vec{\mu}_j = -\vec{\nabla} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N U_i(\vec{r}_j) \cdot \vec{\mu}_j \text{ mit } j \in [1, N]. \quad (3.3)$$

In den Simulationen wird die Schrittweite in einer Matrix geschrieben, die die Raumkoordinaten des verwendeten Koordinatensystems beinhaltet. Es existieren für jede Raumrichtung und jedes Teilchen ein Wert für die Schrittweite. Bei fixierten Teilchen wird dieser auf Null gesetzt. Dadurch muss bei der Simulation nicht zwischen fixierten und variablen Teilchen unterschieden werden, welches den Simulationsalgorithmus stark vereinfacht. Der erhöhte Rechenaufwand, der durch die Berechnung aller Verschiebungen entsteht, wird dabei in Kauf genommen.

Die neuen Koordinaten der Teilchen berechnet sich aus der Summe der berechneten Verschiebungen und der alten Teilchenkoordinaten zu:

$$r_{j,neu} = r_{j,alt} + \Delta \vec{r}_j. \quad (3.4)$$

Für die gesamten Berechnungen wird ein 2-dimensionaler Raum im kartesischen Koordinatensystem gewählt. Angewendet auf das Gesamtpotenzial aus Gleichung (3.1) ergibt sich die alternative Formulierung:

$$U(x, y) = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\alpha_i}{(\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2})^{m_i}} + \frac{\beta_i}{(\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2})^{n_i}} \right). \quad (3.5)$$

Dabei sind x_i und y_i die Koordinaten der jeweiligen Teilchenpotenziale, α_i und β_i die zugehörigen teilchenspezifischen Konstanten und m_i und n_i deren Exponenten. In den Simulationen werden die teilchenspezifischen Konstanten α_i , β_i , m_i und n_i für alle Teilchen identisch gesetzt.

Dadurch vereinfacht sich die Berechnungsformel für das Potenzial weiter zu:

$$U(x, y) = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\alpha}{(\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2})^m} + \frac{\beta}{(\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2})^n} \right). \quad (3.6)$$

Der negative Gradient für das vereinfachte Gesamtpotenzial ist somit:

$$\vec{V}(x, y) = \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \end{pmatrix} = -\vec{\nabla}U(x, y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

$$= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N \left(\frac{m^2 \alpha (x - x_i)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{m/2+1}} - \frac{n^2 \beta (x - x_i)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{n/2+1}} \right) \\ \sum_{i=1}^N \left(\frac{m^2 \alpha (y - y_i)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{m/2+1}} - \frac{n^2 \beta (y - y_i)}{((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2)^{n/2+1}} \right) \end{pmatrix}$$

Der Berechnungsablauf, bei dem sich die Teilchen eines Systems auf Grund ihrer Potentiale zueinander ausrichten, sei am Beispiel eines Systems mit zwei Teilchen erläutert. Dazu werden die Parameter der Potentiale so gewählt, dass der Bindungsabstand zwischen den zwei Teilchen genau eins beträgt. Außerdem wird das Potenzial **ab initio** betrachtet. Das bedeutet, dass das Potenzial keine Einheit besitzt. Somit ist auch der Gradient eine dimensionslose Größe. Dies reicht für eine qualitative Betrachtung aus. Auch die Längen werden ohne Einheiten angegeben.

Für die Simulation wird das Lennard-Jones-12,6-Potenzial verwendet. Die teilchenspezifischen Konstanten α und β werden so gewählt, dass der Bindungsabstand r_0 die Längeneinheit eins einnimmt. Das Verhältnis ergibt sich durch Umstellen der Gleichung (2.66) mit $r_0 = 1$ zu:

$$\frac{\alpha}{\beta} = \frac{n}{m} = \frac{12}{6} = \frac{2}{1} \quad (3.8)$$

Der Parameter β ist mit 1 festgelegt. Es folgt daraus $\alpha = 2$. Das Teilchen 1 ist fixiert und befindet sich im Ursprung des Koordinatensystems. Das Teilchen 2 ist ortsvariabel und wird in einem Abstand bezüglich des Teilchen 1 angeordnet, der größer als r_0 ist. Die Teilchen positionen sind dann: $r_1 = (0; 0)$ und $r_2 = (1,5; 0)$. Der Startzustand der Teilchen ist zusammen mit ihren Potenzialen in Abbildung 3.1 dargestellt. Der blaue Punkt in der Graphik ist r_1 , der Grüne stellt r_2 dar. Die y -Achse ist in dieser Graphik nicht dargestellt, da beide Teilchen auf der x -Achse liegen und sich das zweite Teilchen nur darauf verschieben kann. Das Potenzial ist in z -Richtung aufge-

tragen. Es ist zu sehen, dass sich die beiden Teilchen nicht im Potenzialminimum des jeweils anderen Teilchenpotenzials befinden (blaue und grüne Kurve). Das Gesamtpotenzial ist rot gestrichelt dargestellt. Bei dieser Darstellungsform wird das Gesamtpotenzial für eine anschaulichere Illustration manipuliert (dies wird im nächsten Kapitel genauer erläutert). Die Bereiche der Einzelpotenziale, die größer als null sind, werden auf null gesetzt. Die Rechenvorschrift dafür wird im nächsten Kapitel 3.2 „Ergebnisse des potenzialbasierten Modellierens und deren visuelle Interpretation“ detailliert erläutert.

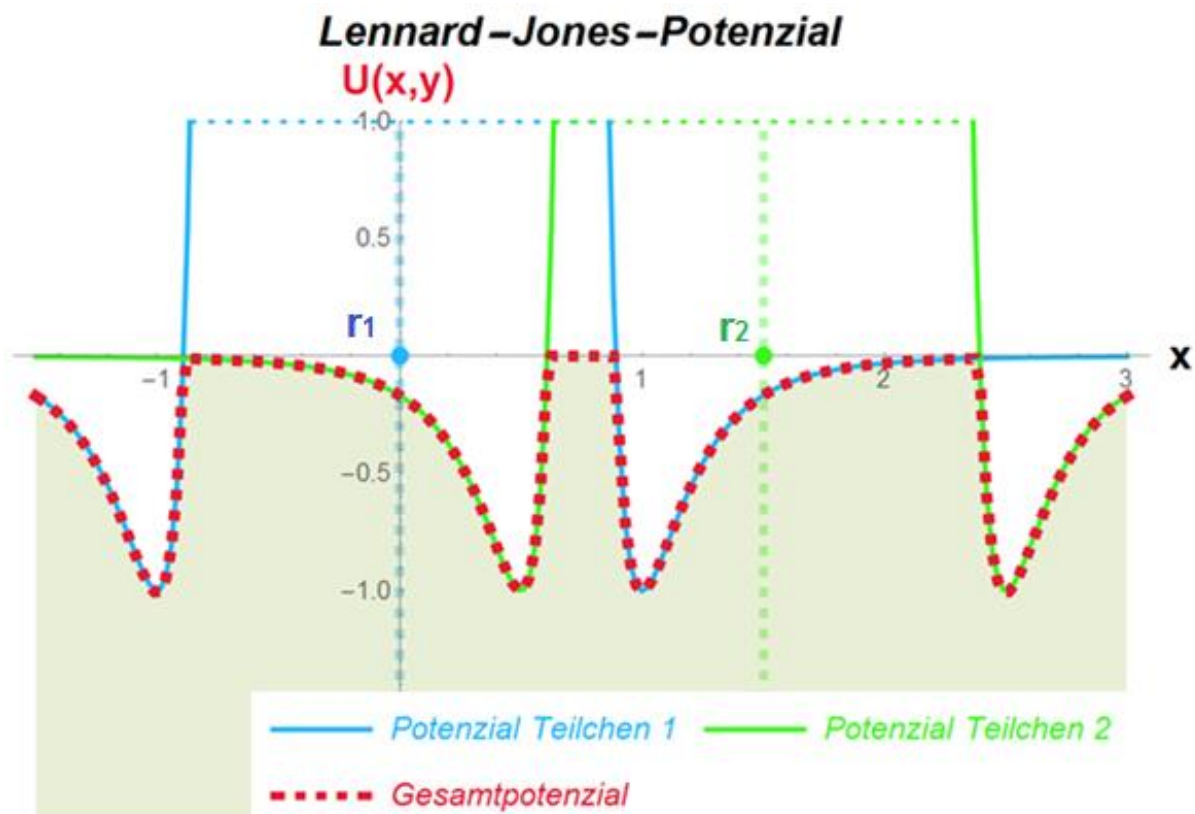


Abbildung 3.1: Simulation mit zwei Teilchen und dem Lennard-Jones-Potenzial. Das blaue Teilchen ist fixiert, das grüne variabel. Die Abbildung zeigt den Anfangszustand des Systems, bei dem die Teilchen sich noch nicht im Potenzialminimum befinden.

Ein Auszug aus den Iterationsschritten ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Die Anzahl der Iterationsschritte ist abhängig von dem gewählten Schrittweitenfaktor μ . Im stationären Endzustand befinden sich beide Teilchen in dem Potenzialminimum des jeweils anderen Teilchens. Der Gradient an dieser Stelle ist null.

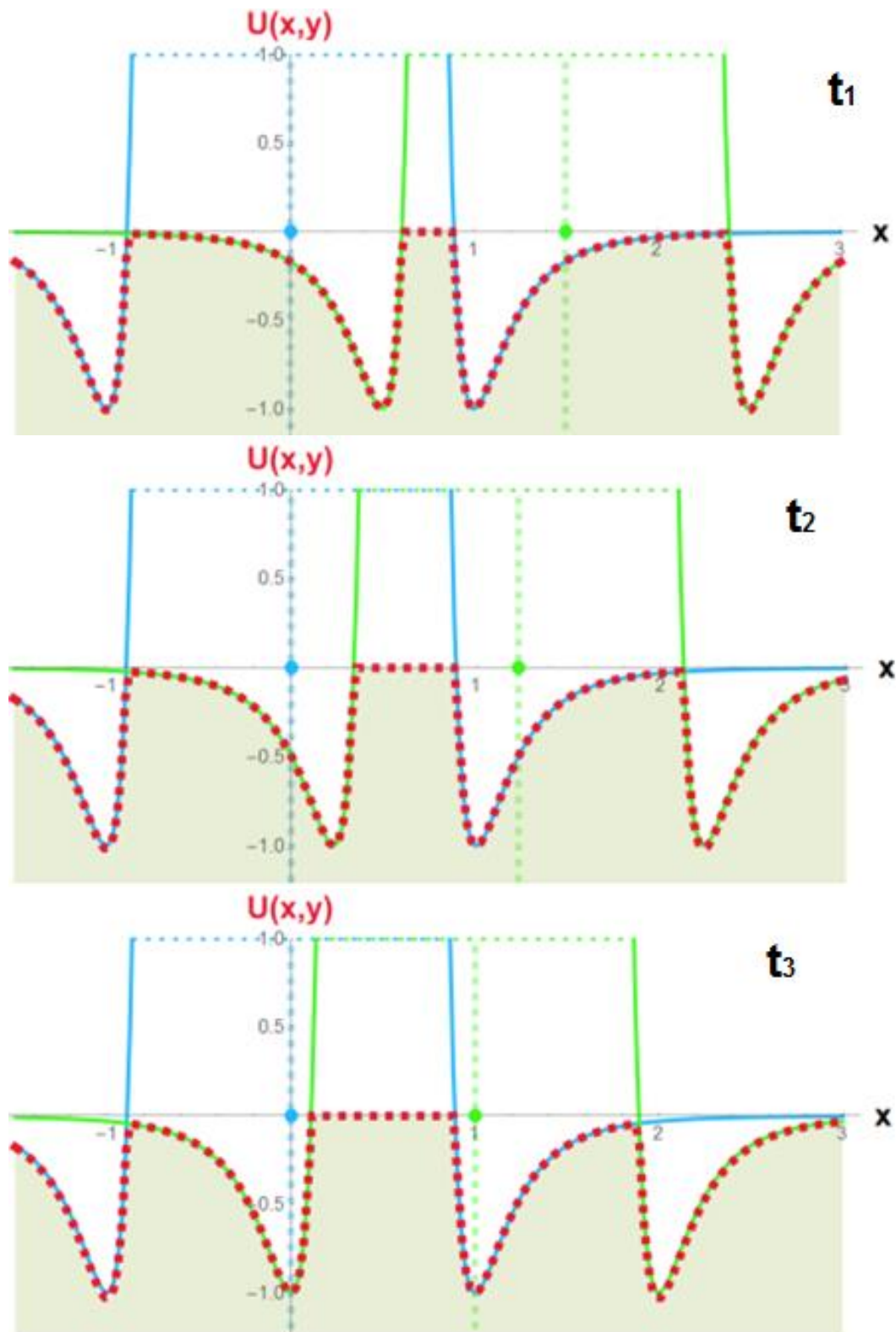


Abbildung 3.2: Simulation mit zwei Teilchen und dem Lennard-Jones-Potenzial. Das blaue Teilchen ist fixiert, das grüne variabel. Dargestellt sind drei Zustände des Iterationsablaufes zu den Zeitpunkten $0 < t_1 < t_2 < t_3$. Die obere Abbildung zeigt den Anfangszustand. Die Teilchen sind noch weit vom Potenzialminimum entfernt. Die mittlere Graphik zeigt den Zwischenstand bei t_2 . Das blaue Teilchen hat sich schon in Richtung Potenzialminimum bewegt. Ganz unten sind beide Teilchen im Potenzialminimum des jeweils anderen Teilchens.

Besteht das System aus mehr als zwei Teilchen oder sind beide Teilchen variabel in ihrer Position, muss die Verschiebung für aller Teilchen berücksichtigt werden. Dazu werden die negativen Gradienten und die Verschiebungen der Teilchen berechnet. Dies wird unter Mathematica durch eine Schleife realisiert, in der der negative Gradient und die Verschiebung für jedes Teilchen nacheinander berechnet werden. Die Schleifendurchläufe ergeben sich aus der Anzahl der Teilchen. Um die Berechnungen durchzuführen, werden verschiedene Matrizen benötigt, in denen die Position der Teilchen, die Schrittweite sowie die Gradienten und Verschiebungen abgelegt werden.

Die Matrix mit den Positionen der Teilchen wird mit A bezeichnet und hat für ein zweidimensionales System die Form:

$$A = \begin{pmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 \\ \vdots & \vdots \\ x_N & y_N \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

wobei N die Anzahl der Teilchen angibt. In ihr sind die Koordinaten der Teilchen hinterlegt. Die Schrittweite wird in der Matrix rb_{sim} abgelegt und ist

$$rb_{sim} = \begin{pmatrix} rb_{r1} \\ \vdots \\ rb_{rN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_{x,r1} & \mu_{y,r1} \\ \vdots & \vdots \\ \mu_{y,rN} & \mu_{y,rN} \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

In der Schrittweitenmatrix werden außer der Schrittweite auch die Randbedingungen berücksichtigt. Ist ein Teilchen im Raum fixiert, wird an der entsprechenden Position in der Matrix der Verschiebungsfaktor auf null gesetzt. Es ist außerdem möglich, dass Teilchen nur in x oder y -Richtung fixiert werden.

In der Matrix $gradNX$ wird der negative Gradient für jedes Teilchen abgelegt:

$$gradNX = \begin{pmatrix} grad_{r1} \\ \vdots \\ grad_{rN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} grad_{x,r1} & grad_{y,r1} \\ \vdots & \vdots \\ grad_{y,rN} & grad_{y,rN} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Zuletzt wird noch eine Matrix für die Verschiebungen benötigt. Hier werden die Verschiebungen für jedes Teilchen gespeichert, die sich aus der Schrittweite und dem negativen Gradienten ergeben:

$$dr = \begin{pmatrix} grad_{r1} \\ \vdots \\ grad_{rN} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} grad_{x,r1} & grad_{y,r1} \\ \vdots & \vdots \\ grad_{x,rN} & grad_{y,rN} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Die Schleife für einen Iterationsdurchlauf und für die Berechnung der Verschiebungen ist in Abbildung 3.3 abgebildet. Die Laufvariable der Schleife ist mit *nxIstart* angeben. Der Startwert ist immer eins. Für das Abbruchkriterium *nxIend* gilt die Anzahl der Teilchen. In der Schleife wird bei jedem Durchlauf der Gradient und die Verschiebung berechnet und in die Matrizen an der entsprechenden Position eingetragen. Ist die Schleife einmal durchlaufen, werden die Verschiebungskomponenten *dr* auf die aktuelle Position der Teilchen addiert.

```
While[nxIstart ≤ nxIend, (* Abbruchkriterium für die Verschiebungsschleife *)

  (* Auswertung des Gradient an der Position des i-ten Teilchens *)
  gradNX[[nxIstart]] = grad[Drop[A, {nxIstart}], α, β, m, n] /. {x → A[[nxIstart, 1]], y → A[[nxIstart, 2]]};
  dr[[nxIstart]] = gradNX[[nxIstart]] rbsim[[nxIstart]]; (* Berechnung der Verschiebungen *)
  nxIstart++; (* erhöht die Laufvariable um 1 *)

];

A = A + dr; (* Verschiebung der Teilchen *)
```

Abbildung 3.3: Programmausschnitt aus dem Mathematica Programm „Potenzialbasierte Modellierung selbstorganisierter Systeme“. Dargestellt ist die Schleife für die Berechnung der Verschiebungen. Die Anzahl der Schleifendurchläufe entspricht der Anzahl der Teilchen.

In der ersten Programmzeile wird der Gradient für das aktuelle Teilchen berechnet. Diese ist Abbildung 3.4 erläutert.

Übergibt die Positionsmatrix ohne
die Position des aktuellen Teilchens

Drop[A, {nxIstart}]

Übergabeparameter

gradNX[[nxIstart]] = grad[Drop[A, {nxIstart}], α, β, m, n] /. {x → A[[nxIstart, 1]], y → A[[nxIstart, 2]]};

Gradienten-
Matrix

Funktion zur Berechnung des
Gradienten

Setzt die Position des aktuellen
Teilchens in die Funktion ein

Abbildung 3.4: Erläuterung der Berechnung des negativen Gradienten eines Teilchens mit Mathematica Programm „Potenzialbasierte Modellierung selbstorganisierter Systeme“

In der zweiten Zeile wird die Verschiebung durch die Multiplikation des negativen Gradienten mit der Schrittweitenmatrix berechnet. Anschließend wird die Laufvariable *nxIstart* um eins erhöht. Bei einem Schleifendurchlauf wird die Verschiebung des Teilchens *nxIstart* berechnet ($nxIstart \equiv j$). Sobald *nxIstart* den Wert *nxIend* erreicht, wird die Schleife abgebrochen und die Verschiebungen auf die Positionsmatrix *A* addiert. Für das Abbruchkriterium *nxIend* gilt die Anzahl der Teilchen des Systems. Dieser Ablauf entspricht einer Iteration. Bis alle Teilchen ihr potenzielles Minimum erreichen, sind abhängig von der Anzahl der Teilchen, der Schrittweite und der Startbedingungen, viele Iterationsschritte erforderlich. Bei den hier durchgeführten Simulationen liegt die Anzahl der Iterationsschritte zwischen 500 und 40000 Iterationen.

Daher wird um die „Verschiebungsschleife“ eine weitere gelegt, welche die Anzahl der Iterationen steuert. Die Laufvariable ist *nxAstart* und bekommt den Startwert eins. Die Iteration wird abgebrochen, sobald die Laufvariable *nxAstart* den Wert *nxAend* erreicht hat. Dieser wird zuvor auf einen Schätzwertwert gesetzt und liegt üblicherweise bei 1000 Schritten. Ist das gewünschte Ergebnis noch nicht erreicht, kann der Iterationsvorgang, ausgehend von dem letzten Zustand des Systems, beliebig oft wiederholt werden.

```
While[nxAstart ≤ nxAend, (* Abbruchkriterium für die Iterationsschleife *)

  nxIstart = 1; (* Startwert für die Verschiebungsschleife wird auf 1 zurückgesetzt *)

  While[nxIstart ≤ nxIend, (* Abbruchkriterium für die Verschiebungsschleife *)

    (* Auswertung des Gradient an der Position des i-ten Teilchens *)
    gradNX[nxIstart] = grad[Drop[A, {nxIstart}], α, β, m, n] /. {x → A[nxIstart, 1], y → A[nxIstart, 2]};
    dr[nxIstart] = gradNX[nxIstart] rbsim[nxIstart]; (* Berechnung der Verschiebungen *)
    nxIstart++; (* erhöht die Laufvariable um 1 *)

  ];

  A = A + dr; (* Verschiebung der Teilchen *)
  nxAstart++; (* erhöht die Laufvariable um 1 *)
];
```

Abbildung 3.5: Programmausschnitt der Schleife für die Berechnung der Verschiebungen. Die Anzahl der inneren Schleifendurchläufe entspricht der Anzahl der Teilchen. Die äußere Schleife steuert die Anzahl der Iterationsschritte.

Der oben beschriebene Programmcode bildet die Grundlage der gesamten Simulationen mit dem Lennard-Jones-Potenzial. In dem Mathematica-Programm „Potenzialbasierte Modellierung selbstorganisierter Systeme“, wurden weitere Modifikationen implementiert. Unter anderem wurde die Möglichkeit einer gradientenabhängigen Schrittweitenberechnung getestet. Außerdem kann zwischen einer festen Iterations-

anzahl und einer vorgegebenen Konvergenzgrenze als Abbruch-Kriterium ausgewählt werden. Die Erstellung der Matrizen für die Startpositionen der Teilchen und die Schrittweite sowie für die Einbindung von Randbedingungen wurden in weiteren Programmodulen entwickelt. Eine graphische Bedienoberfläche, die die Manipulation der Parameter ermöglicht, wurde ebenfalls vorgesehen. Die Ergebnisse der Simulationen werden in Form von Diagrammen visuell dargestellt.

3.2 Ergebnisse des potenzialbasierten Modellierens und deren visuelle Interpretation

Für die Auswertung der Ergebnisse der Simulationen eignen sich graphische Darstellungen besonders gut. Abhängig davon, welche Eigenschaften eines Systems untersucht werden sollen, können die Daten durch verschiedene Diagramme ausgewertet werden. Da die Topologie bei dem potenzialbasierten Modellieren im Vordergrund steht, ist die geometrische Anordnung der Teilchens ein wesentliches Kriterium zur Beurteilung der Prozesse. In einem einfachen 2-dimensionalen Diagramm lassen sich die Positionen der Teilchen für ein ebenes System gut darstellen und beurteilen. Dieses bildet die Darstellungsgrundlage für die Simulationen und ist in Abbildung 3.6

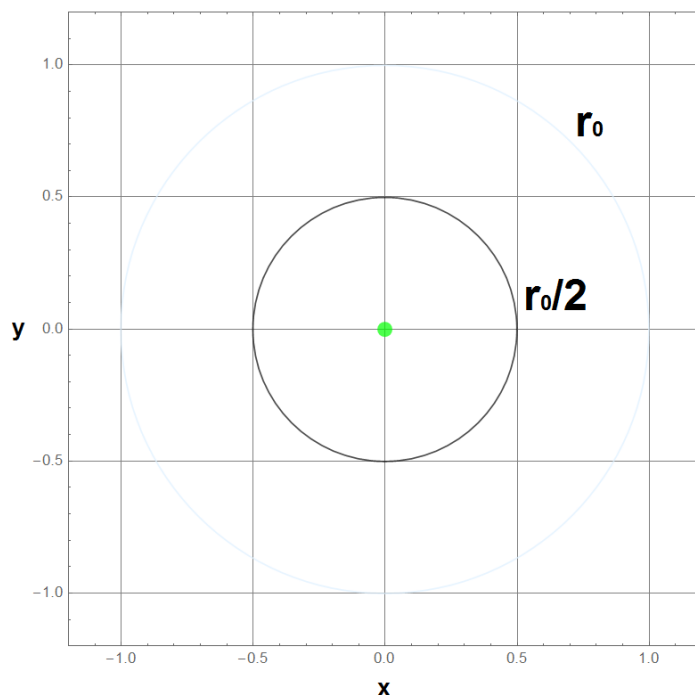


Abbildung 3.6: Einfache Darstellung der Teilchenpositionen in einem ebenen xy -Diagramm. Der Kreis $r_0/2$ entspricht dem Raum, den ein Teilchen einnimmt. Der Kreis r_0 ist der Abstand, bei dem das Teilchen sein Potenzialminimum besitzt.

dargestellt. Die beiden Kreise r_0 und $r_0/2$ dienen zur Visualisierung des Potenzialminimums (r_0) des Teilchens und dem Raum, den ein Teilchen in einem System einnimmt.

Um Strukturen und Geometrien hervorzuheben, sind über die Ortsdiagramme gelegte Netze sehr hilfreich. In der Abbildung 3.7 sind der Anfangszustand und der Endzustand eines Vielteilchensystems dargestellt. Die linken Diagramme zeigen die eifache

chen Ortsdiagramme der Teilchen in der xy -Ebene. In der Mitte ist das Ortsdiagramm mit einem Delaunay-Netz zusammen abgebildet. Die rechten Diagramme zeigen das Ortsdiagramm mit einem Voronoi-Netz. Das Delaunay-Netz verbindet die umliegenden Teilchen durch gerade Linien. Bei dem Voronoi-Netz bildet jedes Teilchen das Zentrum eines Areals, welches in Bezug zur euklidischen Metrik näher an dem Zentrum der Region liegen als an jedem anderen Zentrum. An den drei Diagrammen ist sehr gut zu erkennen, dass durch die Netze die Anordnung im Sinne einer geometrischen Deutung verbessert werden.

Ein weiteres Hauptaugenmerk liegt auf den Energiezustand des Systems. Der Energiezustand kann durch Potenzialdiagramme dargestellt werden. Das Potenzial eines Teilchen ist durch die räumliche Anordnung seiner umgebenden Teilchen festgelegt. Das Potenzial des betrachteten Teilchens wird dabei nicht berücksichtigt. Das Gesamtpotenzial eines Teilchensystems ist bestimmt durch die Überlagerung aller Ein-

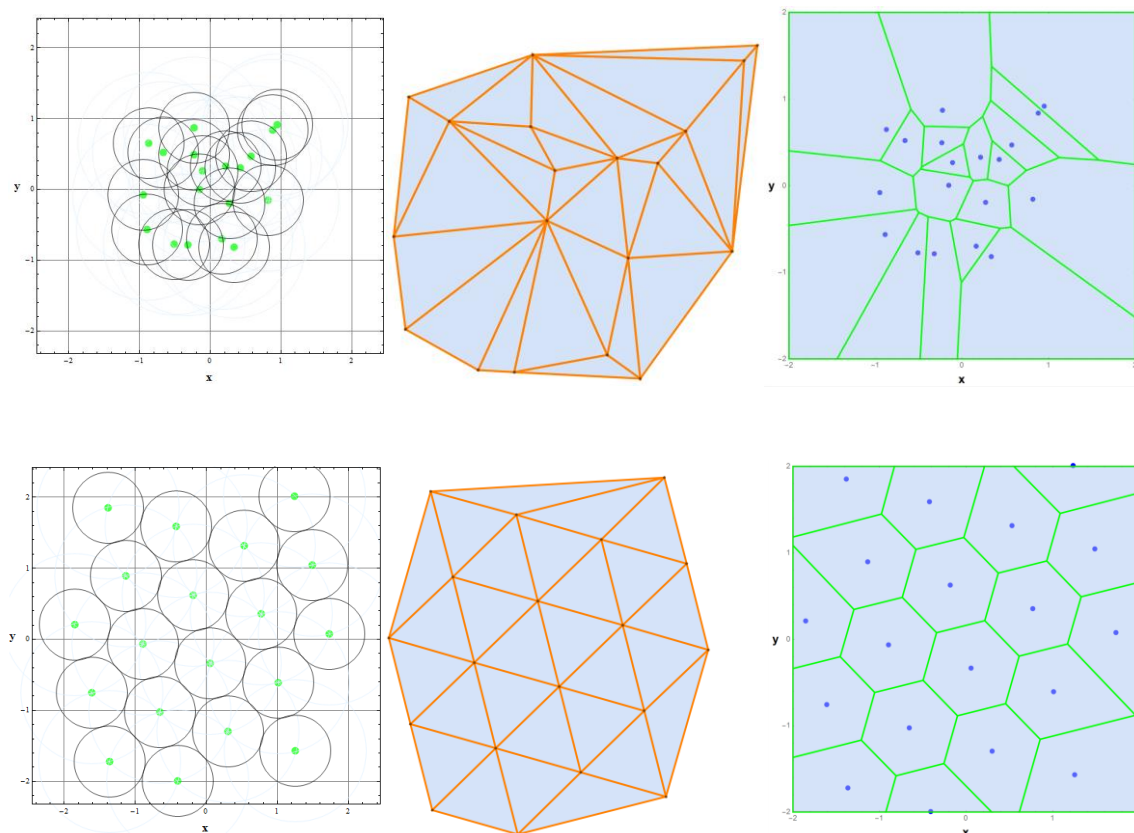


Abbildung 3.7: Verschiedene Darstellungsformen im Ortsdiagramm. Links sind die Orte der Teilchen in der xy -Ebene als grüne Punkte dargestellt. In der Mitte sind die Teilchen durch ein Delaunay-Netz miteinander verbunden. Die rechten Diagrammen zeigen die Teilchen mit einem Voronoi-Netz. Die oberen Diagramme zeigen den Anfangszustand des Systems, die untere Reihe den Endzustand.

zelpotenziale. Bedingt durch die mathematische Beschreibung des Lennard-Jones-Potenzials, der hyperbolischen Zunahme der Funktion mit abnehmenden Abstand zum Teilchen, ist eine anschauliche Darstellung im 3D-Gesamtpotenzial nicht möglich. Um dennoch eine sinnvolle Darstellung zu ermöglichen, wird die Funktion bereichsweise abgeschnitten. Für den Bereich $|\vec{r}| < r_1$ wird das Potenzial auf den Wert 0 gesetzt. Der Abstand r_1 ist der Null-Durchgang des Lennard-Jones-Potenzials und berechnet sich zu:

$$r_1(\vec{r}) = e^{\frac{\log \alpha - \log \beta}{m-n}}. \quad (3.13)$$

Die Berechnung des Gesamtpotenzials erfolgt mit der zusammengesetzten Funktion:

$$U_{ges}(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{für } |\vec{r}| < r_1 \\ U(\vec{r}) & \text{für } |\vec{r}| \geq r_1 \end{cases} \quad (3.14)$$

Das Gesamtpotenzial des oben aufgeführten Vielteilchensystems zeigt Abbildung 3.8 aus verschiedenen Perspektiven, inklusive des Anfangs- und des Endzustands. Der skalare Wert des Potenzials ist zudem durch eine farbliche Skalierung vermittelt. Mit blau sind die Orte der kleinsten potenziellen Energie markiert. Anhand der Gesamtpotenzialdiagramme kann abgeschätzt werden, wie stark ein Teilchen im System gebunden ist. Um so kleiner die potenzielle Energie eines Teilchen ist, desto stabiler ist das Teilchen im System gebunden.

In einer zweidimensionalen Darstellung können die Gesamtpotenziale als Konturdiagramm dargestellt werden. Wie bei den 3D-Potenzialdiagrammen, gibt die Farbe den Wert des Potenzials abhängig vom Ort wieder. Die Abbildung 3.9 zeigt das Gesamtpotenzial des Systems zusammen mit den Orten der Teilchen. Links ist der Startzustand und rechts der Endzustand dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass sich alle Teilchen im Endzustand in ihrem Potenzialminimum befinden.

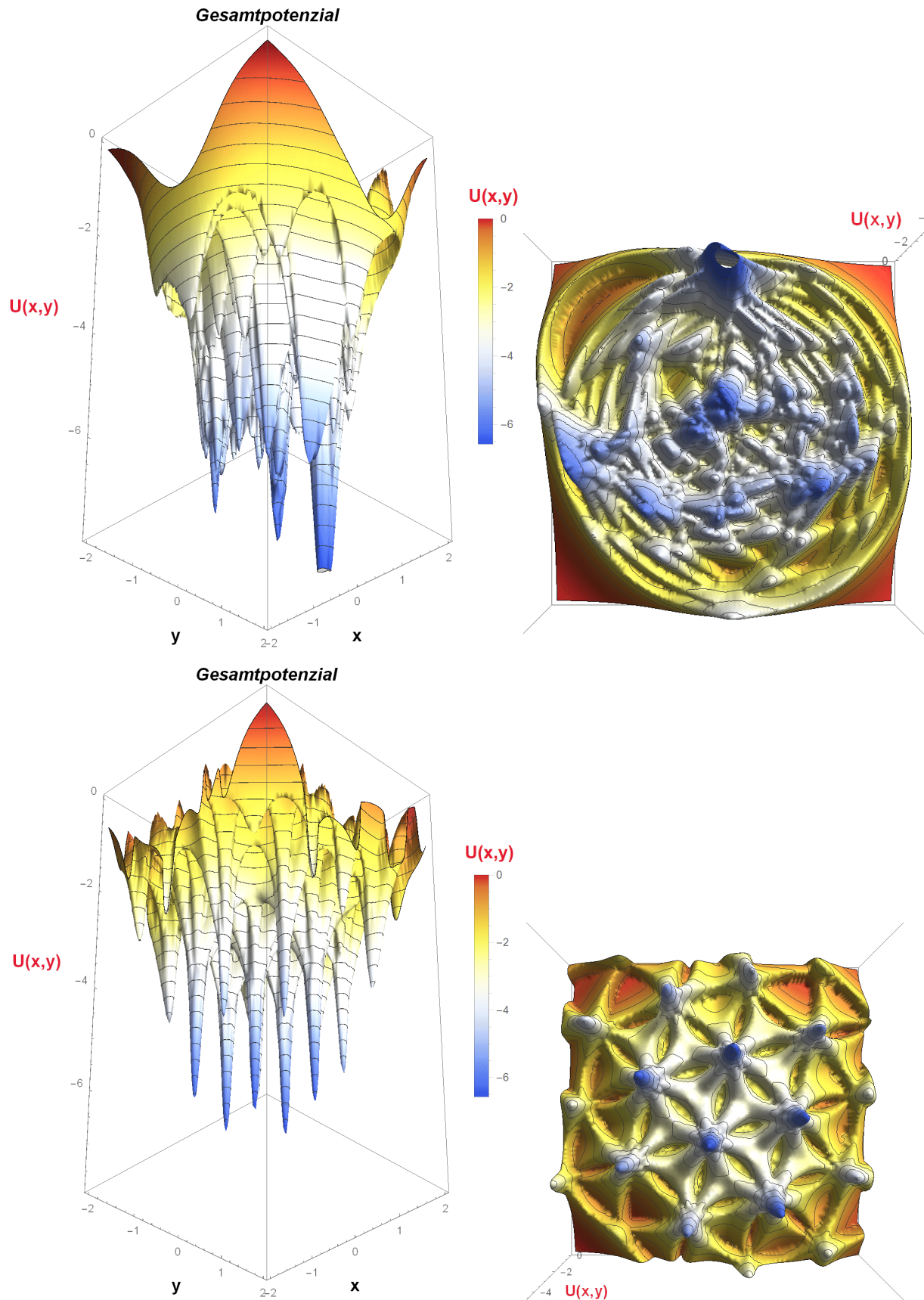


Abbildung 3.8: Gesamtpotenzial eines Vielteilchensystems aus zwei verschiedenen Perspektiven. Die oberen Diagramme zeigen den Anfangszustand des Systems, die untere Reihe den Endzustand.

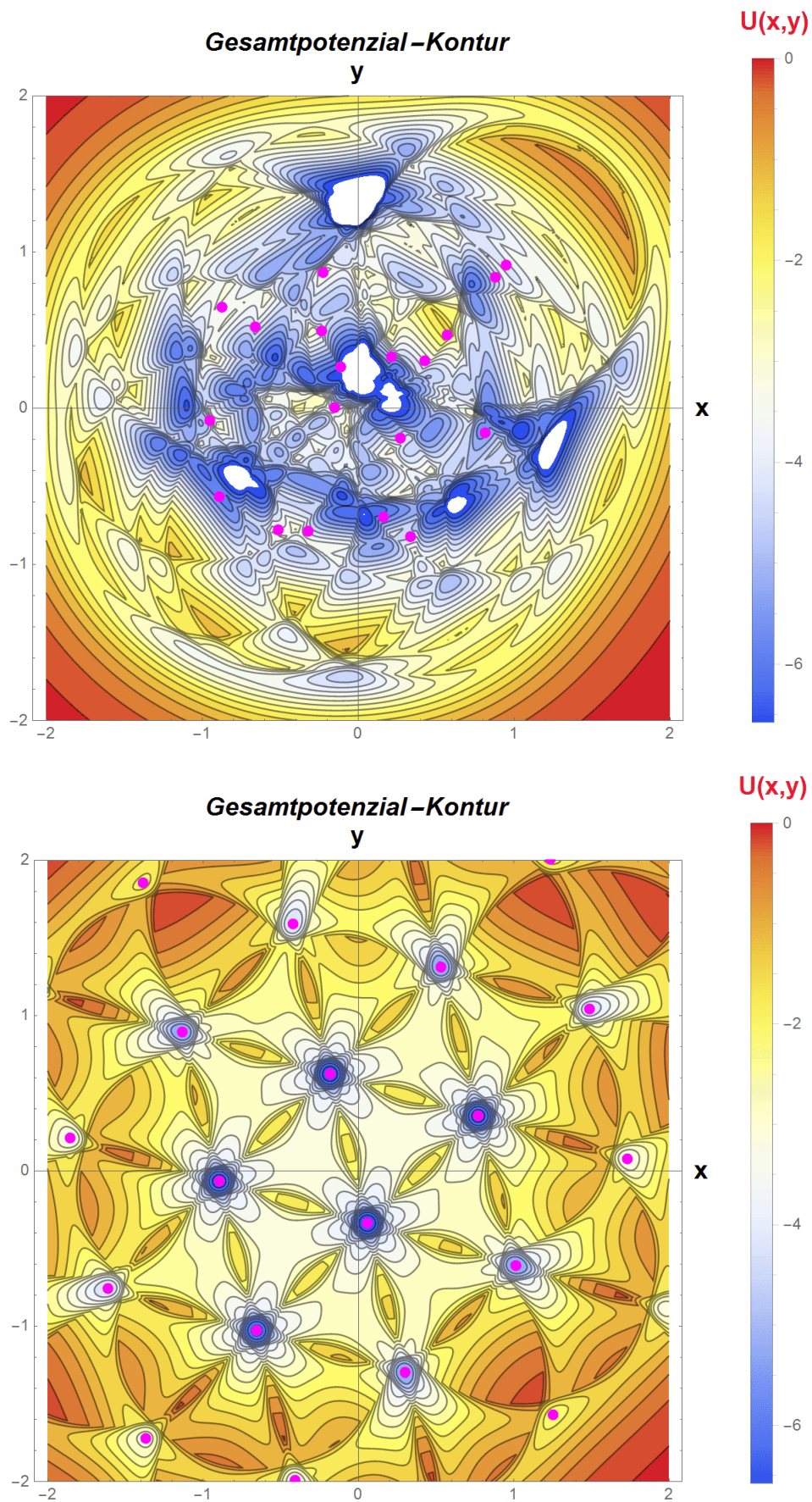


Abbildung 3.9: 2D-Gesamtpotenzial als Konturdiagramm eines Vielteilchensystems: oben der Anfangszustand und unten der Endzustand.

Die Abbildung 3.10 zeigt das Energieniveau der Teilchen als 3D-Diagramm. Das Energieniveau eines Teilchens entspricht der potenziellen Energie, welche das Teilchen bezogen auf das System an seinem Ort besitzt. Die dargestellten Diagramme zeigen im Gegensatz zu den vorherigen Darstellungen das Potenzialniveau der Teilchen. Der Verlauf zwischen den Teilchenpotenziale wird interpoliert.

Die Darstellungen sind in der aufgeführten Form nur für zweidimensionale Systeme geeignet. Bei dreidimensionalen Systemen lassen sich die Diagramme in Schicht- oder Schalendiagramme abbilden. Die Prozessabläufe können am besten im Videoformat dargestellt werden. Dazu werden in der Simulation nach einer auswählbaren Anzahl an Iterationsschritten die Positionen in einer Matrix gespeichert. Aus den Daten werden Videos aus den oben aufgeführten Diagramme erzeugt.

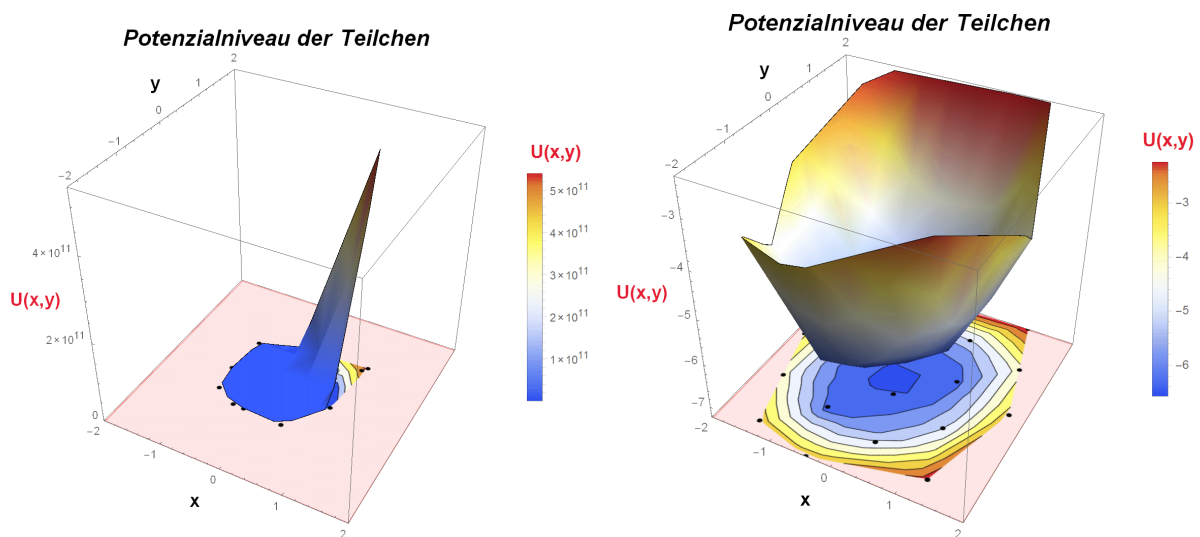


Abbildung 3.10: 3D Energieniveau der Teilchen eines Vielteilchensystems links des Anfangszustandes und rechts des Endzustandes.

4 Potenzialbasierte Modellierung ausgewählter Systeme

*Alles Gescheite ist schon gedacht worden,
man muss nur versuchen, es noch einmal zu denken.
(Johann Wolfgang von Goethe)*

In diesem Kapitel erfolgt eine Auswahl potenzialbasierter Simulationen. Die aufgeführten Beispiele zeigen, wie sich die Systeme verhalten und wie Strukturen und Muster durch das Potenzial seiner Teilchen vorhersagbar werden. Zunächst werden einige einfache dynamische Simulationen mit dem harmonischen Potenzial aufgeführt, unter Berücksichtigung der kinetischen Energie und der Dissipation von Systemen. Sie zeigen, wie die kinetischen Energien das Systemverhalten signifikant beeinflussen. Das Prinzip dient als Grundlage für eine noch ausstehende Erweiterung auf dynamische Simulationen von Vielteilchensystemen.

Im zweiten Teil erfolgt der Schritt zu Vielteilchen-Simulationen mit dem Lennard-Jones-Potenzial. Diese bilden die Grundlage für das weitere Vorgehen bei der Erarbeitung potenzialbasierter Modellierung selbstorganisierter Systeme.

4.1 Simulationsbeispiele für Systeme mit dem harmonischen Potenzial

In den Simulationen mit dem harmonischen Potenzial werden dynamische Systeme mit Hilfe des Lagrange'schen Formalismus gelöst. Sie zeigen, wie die kinetische Energie in potenzialbasierten Systemen Berücksichtigung findet. Die Simulationen können als Basis für die Erweiterung von Vielteilchensystemen verstanden werden. Es wird das grundsätzliche Vorgehen für ein Teilchen oder Knoten dargestellt. Eine Simulation, in der die kinetische Energie eines Vielteilchensystems berücksichtigt ist, wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt.

4.1.1 Feder-Masse-Systeme mit Schraubenfedern

In diesem Beispiel soll gezeigt werden, wie ein Feder-Masse-System mit einem potenzialbasierten Ansatz berechnet werden kann. Das zu untersuchende Feder-Masse-System ist in Abbildung 4.5 zu sehen. Links ist die Seitenansicht des Systems

abgebildet. Die rechte Abbildung zeigt die Draufsicht. Die Feder k_1 ist in dem Punkt P_{01} drehbar gelagert. Das andere Ende der Feder ist mit der Masse m verbunden.

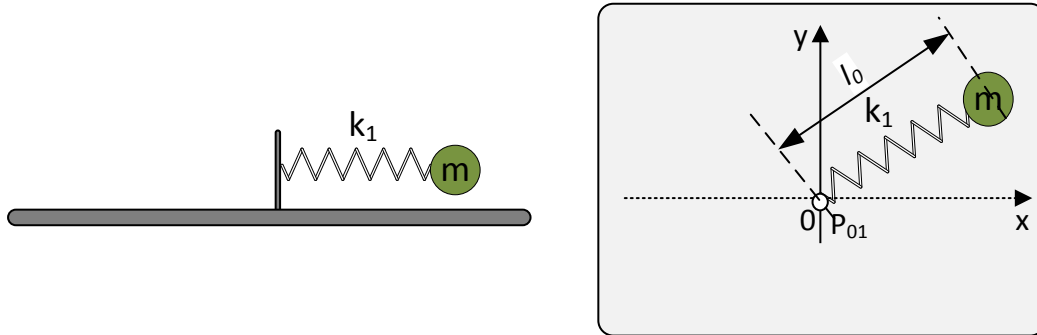


Abbildung 4.1: Federsystem mit der entspannten Feder $l_0 > 0$ und einer Masse.

Die Länge der entspannten Feder l_0 wird größer null gewählt. Dadurch entstehen anders als bei dem Beispiel im Kapitel 2.5.2, ein Druckbereich und ein Zugbereich. Bei einer Stauchung der Feder zeigt die Kraft der Feder vom Lagepunkt P_{01} weg. Bei einer Dehnung der Feder zeigt die Federkraft in Richtung des Lagepunkts P_{01} . Das harmonische Potenzial wird durch die Gleichung (2.47) beschrieben. Für die Masse m wird 1 kg festgelegt. Die Eigenkreisfrequenz des Systems beträgt $\omega_0 = 6,28\text{ rad/s}$. Daraus folgt durch Umstellen der Gleichung (2.53) die Federsteifigkeit $k = 4\pi^2\text{ kg/s}$ mit der Länge $l_0 = 2\text{ m}$. Es ergibt sich aus der Gleichung (2.45) für die potenzielle Energie:

$$E_{\text{pot}}(\vec{r}) = k \cdot U(\vec{r}) = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (|\vec{r}| - l_0)^2. \quad (4.1)$$

Die potenzielle Energie als Funktion des Ortes ist in Abbildung 4.5 im 3D-Diagramm abgebildet. Es ist zu erkennen, dass die potenzielle Energie einen Graben um das Zentrum bildet. Der Abstand zum Zentrum entspricht der Länge l_0 . Die potenzielle Energie nimmt von dort mit zunehmenden Abstand quadratisch zu. Mit abnehmenden Abstand gilt dies ebenfalls, da von einer linearen Federsteifigkeit ausgegangen wird. Im Ursprung nimmt die potenzielle Energie einen endlichen Wert an $E_{\text{pot}}(\vec{r} = 0)$. Für das aufgeführte Beispiel beträgt die potenzielle Energie $E_{\text{pot}}(\vec{r} = 0) = 2\text{ Nm}$. Dies ist bei einer realen Schraubenfeder nicht realistisch. Sobald die Windungen der Feder aufeinander liegen, ändert sich die Steifigkeit signifikant. Daher muss bei der Auslegung beachtet werden, dass die Berechnung nur für

einen begrenzten Bereich um l_0 gültig ist. Dieser Bereich ist abhängig von der verwendeten Feder, ihrem Aufbau sowie von dem verwendeten Material. In der hier dargestellten Simulation werden diese Einschränkungen allerdings nicht berücksichtigt und das System als ideal betrachtet.

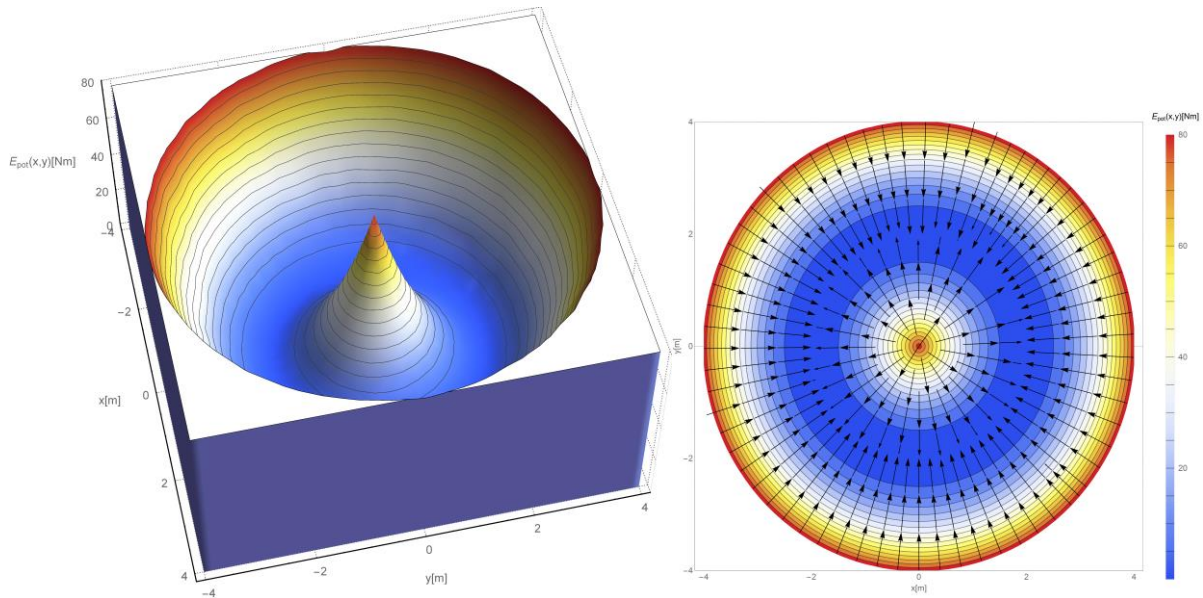


Abbildung 4.2: Links ist das 3D-Energiediagramm eines Feder-Masse-System mit $l_0 = 0$ abgebildet. Rechts ist das 2D-Energiediagramm als Kontur zusammen mit den Kraftfeldlinien dargestellt.

Für die dynamische Analyse des Systems wird die Lagrange-Funktion nach Gleichung (2.51) aufgestellt:

$$L(\vec{r}, \dot{\vec{r}}, t) = \underbrace{\frac{1}{2} \mathbf{m} \cdot (\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2)}_{E_{kin}} - \underbrace{\frac{1}{2} k \cdot (-l_0 + \sqrt{x(t)^2 + y(t)^2})^2}_{E_{pot}}. \quad (4.2)$$

Für die Bewegungsgleichungen ergibt sich:

$$\begin{pmatrix} -k \cdot x(t) + \frac{k \cdot l_0 \cdot x(t)}{\sqrt{x(t)^2 + y(t)^2}} - \mathbf{m} \cdot \ddot{x}(t) \\ -k \cdot y(t) + \frac{k \cdot l_0 \cdot y(t)}{\sqrt{x(t)^2 + y(t)^2}} - \mathbf{m} \cdot \ddot{y}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Die Anfangsbedingungen für den Startpunkt sind: $\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix} [m]$. Die Startgeschwindigkeiten sind: $\begin{pmatrix} \dot{x}_0 \\ \dot{y}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \left[\frac{m}{s} \right]$.

Da die Masse nur in x -Richtung ausgelenkt wurde, beschreibt die Bewegung der Masse eine harmonische Schwingung um die Ruhelage der Feder $l_0 = 2\text{ m}$ auf der x -Achse. Der zeitliche Verlauf ist in Abbildung 4.3 links dargestellt. Die Trajektorie der Masse ist im 3D-Energiediagramm der Abbildung 4.3 zu sehen. Es ist deutlich zu sehen, wie die Masse um die Ruhelage l_0 schwingt (rote Kurve). Bei der Darstellung ist die potenzielle Energie $E_{pot}(t)$ in z -Richtung aufgetragen.

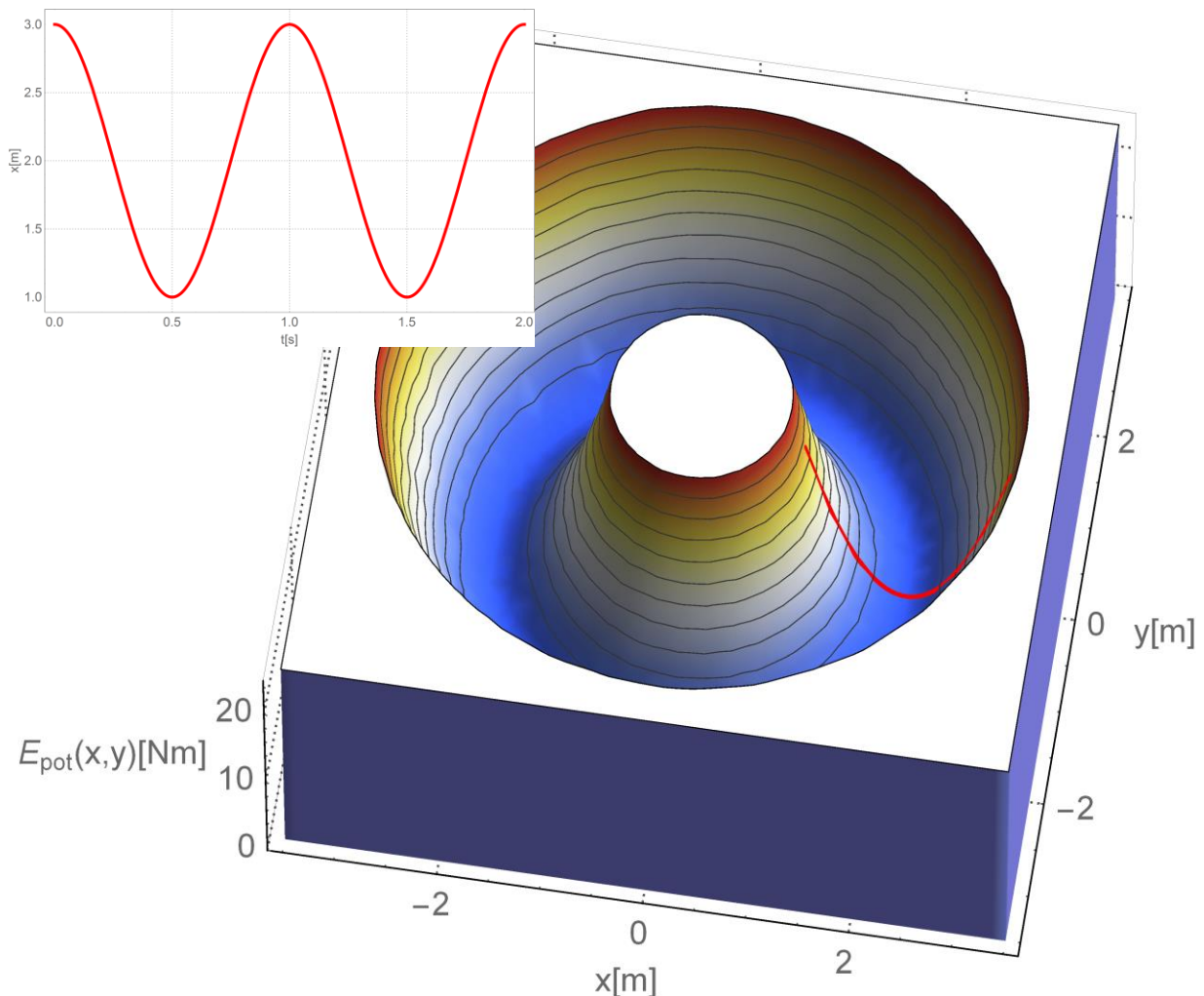


Abbildung 4.3: Bewegungsverlauf der Masse im 3D-Energiediagramm. Oben links ist der Bewegungsverlauf bezüglich der x -Achse dargestellt.

Werden die Randbedingungen für die Startgeschwindigkeit in y -Richtung auf $\dot{y}_0 = 1/2 \frac{m}{s}$ geändert, ergibt sich der Bewegungsverlauf nach Abbildung 4.4. Die Simulationszeit beträgt $t_{sim} = 10$ Sekunden. Durch die Anfangsgeschwindigkeit bewegt sich die Masse um den Lagerpunkt der Feder. Zusammen mit der überlagerten Radialschwingung (Abbildung 4.4 links) entsteht das abgebildete Bewegungsmuster.

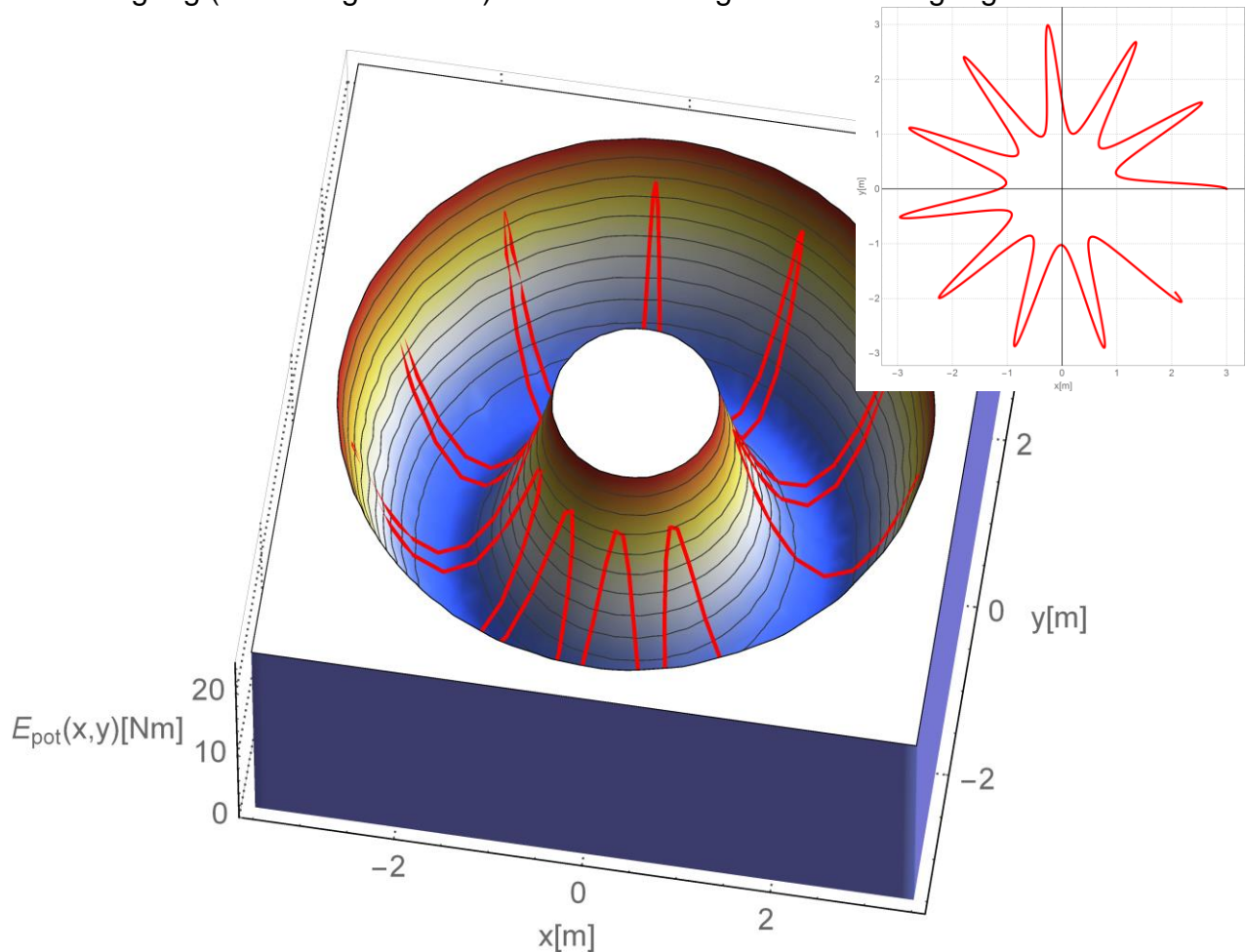


Abbildung 4.4: Bei einer Anfangsgeschwindigkeit der Masse in y -Richtung und einer Anfangsauslenkung, bewegt sich die Masse mit Pendelbewegungen um den Lagerpunkt der Feder. Zu sehen ist der Bewegungsverlauf der Masse im 3D-Energiediagramm. Die Graphik Oben rechts zeigt die Bewegung in der xy -Ebene.

4.1.2 Feder-Masse-Systeme mit zwei Schraubenfedern

Das zu untersuchende Feder-Masse-System möge nun 2 Schraubenfedern aufweisen, siehe Abbildung 4.5. Links ist die Seitenansicht des Systems abgebildet. Die rechte Abbildung zeigt die Draufsicht. Die Federn k_1 und k_2 sind in den Punkten P_{01} und P_{02} drehbar gelagert. Das jeweils andere Ende der Federn ist mit der Masse m ebenfalls drehbar gelagert. Zudem wird bei der Berechnung davon ausgegangen, dass alle Positionen für die Masse zulässig sind. Die Federn können sich also ge-

gegenseitig durchdringen. Mechanisch ließe sich dies durch einen Versatz in z -Richtung realisieren, sodass die Federn auf zwei Ebenen übereinander liegen.

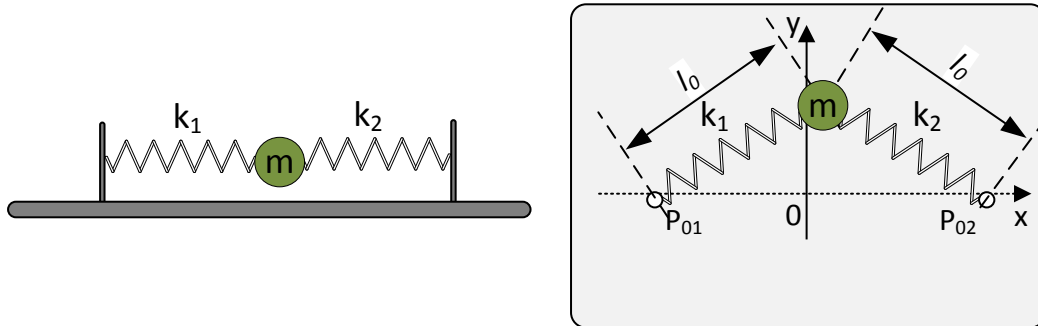


Abbildung 4.5: Mechanischer Aufbau eines Feder- Masse-Systems mit 2 Federn.

Für die potenzielle Energie des Systems ergibt sich aus der Überlagerung der beiden potenziellen Energien :

$$E_{pot}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n k_i \cdot (|\vec{r} - \vec{r}_i| - l_i)^2. \quad (4.4)$$

Es ergibt sich mit den entspannten Federlängen l_1 und l_2 , den Federsteifigkeiten k_1 und k_2 sowie den Befestigungspunkten $P_{01} = (x_1; y_1)$ und $P_{02} = (x_2; y_2)$ die Funktion für die potenzielle Gesamtenergie zu:

$$E_{pot}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left(k_1 \left(\sqrt{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2} - l_1 \right)^2 + k_2 \left(\sqrt{(x - x_2)^2 + (y - y_2)^2} - l_2 \right)^2 \right). \quad (4.5)$$

Das 3D-Energiediagramm ist in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Abbildung 4.7 zeigt das 2D-Energiekonturdiagramm mit den Kreisen der Länge l_1 und l_2 , bei denen diese Federn entspannt sich.

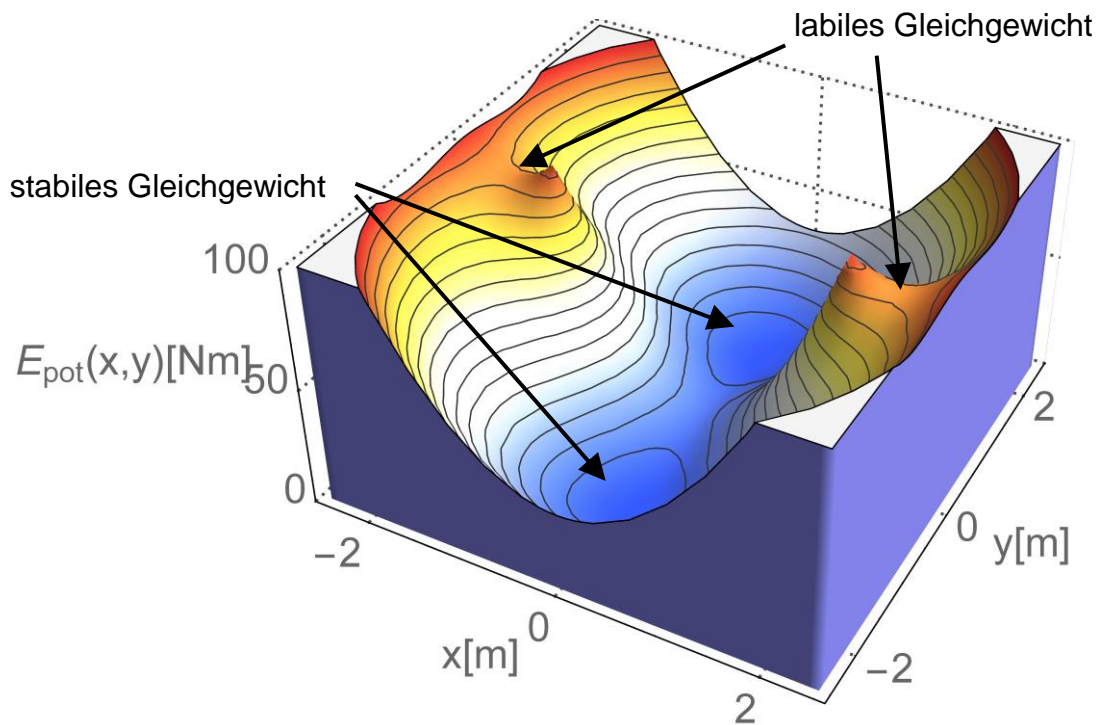


Abbildung 4.6: 3D-Energiediagramm eines Feder-Masse-Systems mit zwei Schraubenfedern. Es entstehen durch die Konfiguration zwei Energieminima, in denen das System einen stabilen Zustand einnehmen kann.

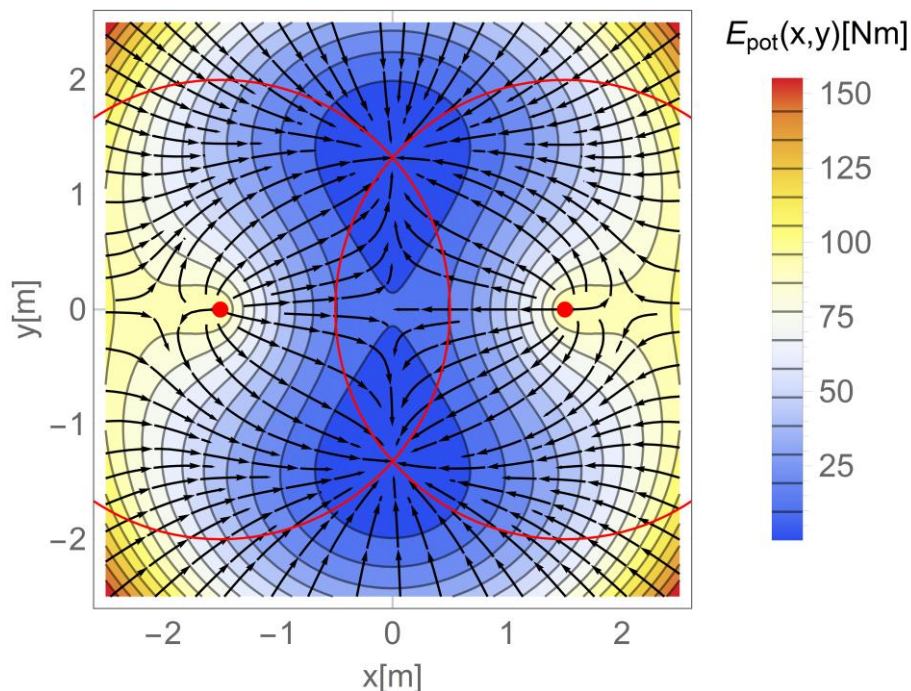


Abbildung 4.7: 2D-Energiediagramm eines Feder-Masse-Systems mit zwei Schraubenfedern. Es entstehen durch die Konfiguration zwei Energieminima, in denen das System einen stabilen Zustand einnimmt.

Aus dem 3D-Energiediagramm lassen sich einige wichtige Merkmale des Systems ablesen. Es fällt sofort auf, dass das System zwei Energieminima besitzt. Das sind die dunkelblauen „Mulden“ in den 2D- und 3D-Energiediagrammen. Zudem besitzt das System zwei weitere interessante Bereiche, an denen ein labiles Gleichgewicht

herrscht. Die Energieminima befinden sich an den Orten, an denen beide Federn entspannt sind und sich die Längen l_0 einstellen. In der Konturdarstellung entsprechen diese Orte den Schnittpunkten der Kreise mit den Radien l_0 . Da diese Konfiguration mit zwei Minima ergibt, ist die Vorhersage nicht trivial, welchen Endzustand das System einnimmt, wenn es aus einem dynamischen Zustand in den statischen übergeht. Letzterer ist nämlich von den Anfangsbedingungen abhängig und kann in einem realen System nur bedingt vorausgesagt werden. Der Ort, an dem ein labiles Gleichgewicht herrscht, ist ein Zustand, in dem zwar ein Kräftegleichgewicht vorliegt, es jedoch bei einer kleinsten Verschiebung aus dieser Position kippt und einen stabileren Zustand einnimmt.

Wird dieses System dynamisch betrachtet, ergibt sich mit den Anfangsbedingungen für die Geschwindigkeiten der Masse $(\dot{x}_0; \dot{y}_0) = (0; 0) \left[\frac{m}{s} \right]$ und für die Position der Masse $(x_0; y_0) = (\hat{x}; \hat{y}) = (0; -2,5)[m]$ der Verlauf, wie er in Abbildung 4.8 dargestellt ist. Ohne Dämpfung wird die Masse stets zwischen den beiden Maximalauslenkungen hin und her schwingen.

Besitzt das System eine zusätzliche, geschwindigkeitsproportionale Dämpfung, wird sich die Masse im stationären Zustand in einem der beiden Energieminima zur Ruhe kommen (siehe Abbildung 4.9). Die Dämpfung wurde so groß gewählt, dass die Masse bereits im ersten Energieminimum zur Ruhe kommt. Für die Dämpfungskonstante wurde $d = 10 \frac{kg}{s}$ gewählt. Die Masse bewegt sich bei ausreichend hoher Dämpfung entlang der Kraftlinien.

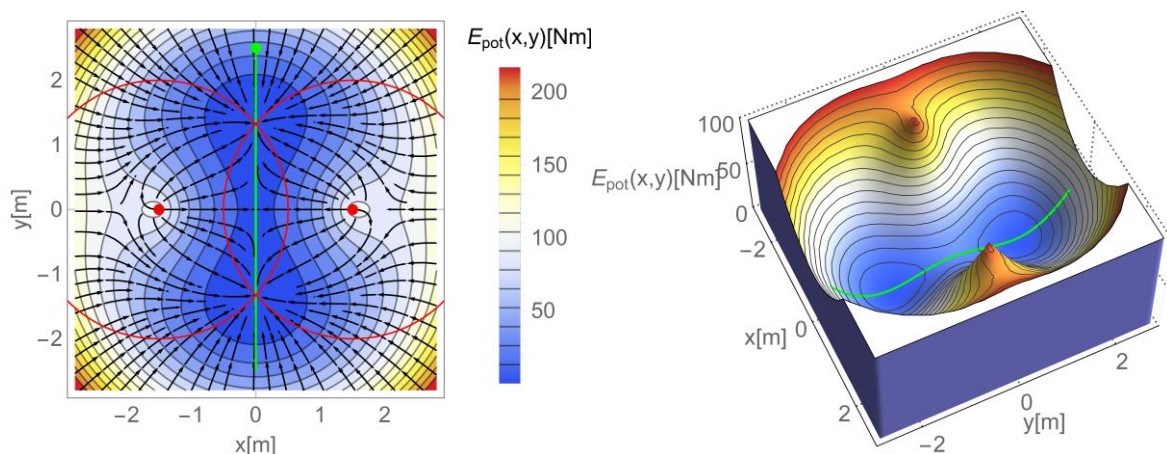


Abbildung 4.8: Links: 2D-Energiediagramm mit dem Bewegungsverlauf der Masse; rechts: 3D-Energiediagramm zusammen mit dem Bewegungsverlauf der Masse.

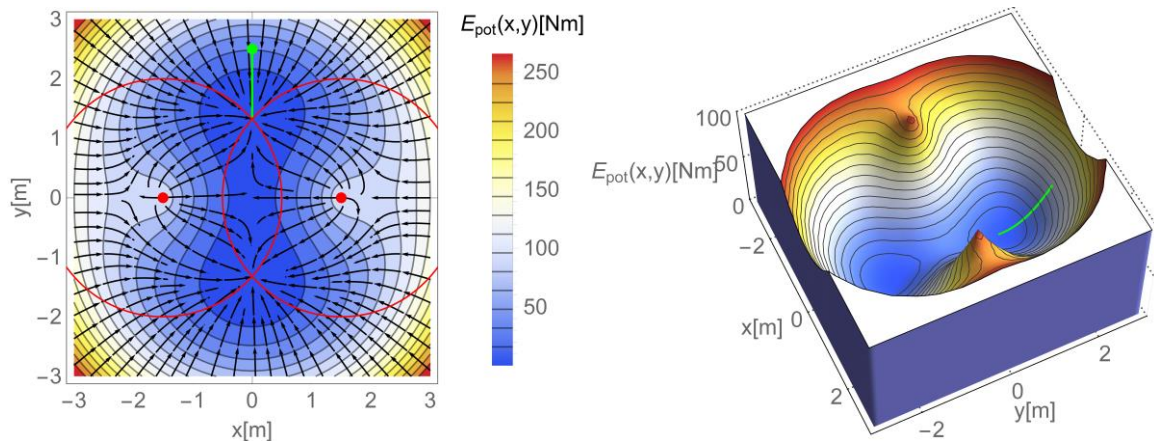


Abbildung 4.9: Links: 2D-Energiediagramm mit dem Kraftfeld und dem Bewegungsverlauf der Masse. Rechts: 3D-Energiediagramm zusammen mit dem Bewegungsverlauf der Masse.

In dem nächsten Beispiel soll gezeigt werden, wie sich das Feld der potenzielle Energie verändert, wenn die Federn nicht die gleiche Länge l_0 haben. Für das in Abbildung 4.10 aufgezeigte Beispiel wurde für die Längen $l_1 = 3\text{ m}$ und $l_2 = 2\text{ m}$ gewählt. Die Dämpfung $d = 0,5 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ ist wesentlich geringer als im vorherigen Beispiel. Die Gesamtenergie ist nun nicht mehr symmetrisch und die Energieminima verschieben sich in die Richtung der Feder mit der kürzeren Federlänge l_0 . Das Minimum befindet sich an den Schnittpunkten der beiden Längen l_1 und l_2 .

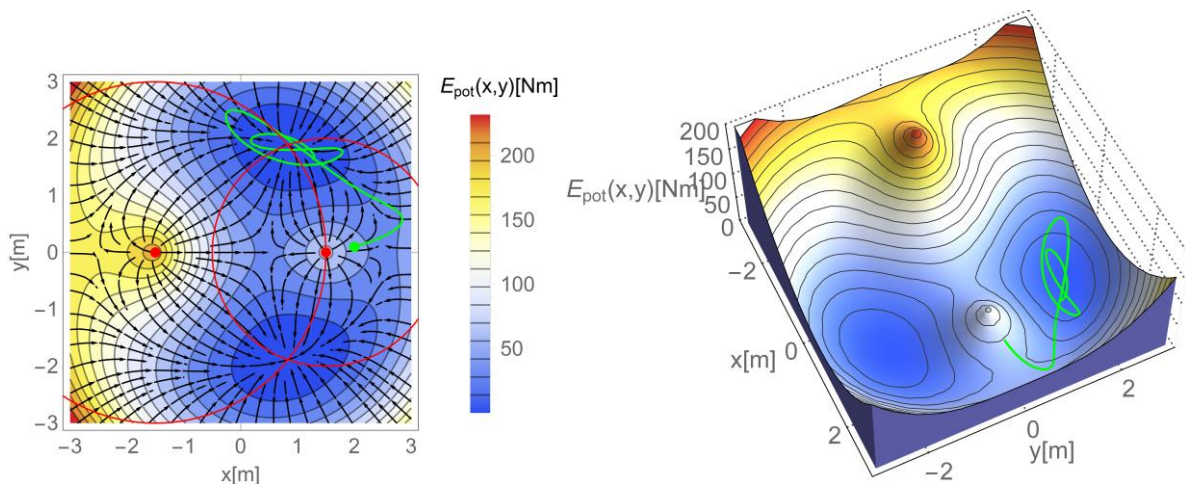


Abbildung 4.10: Links: Energiediagramm in der Konturdarstellung mit dem Kraftfeld und den Bewegungsverlauf der Masse. Rechts: 3D-Energiediagramm zusammen mit dem Bewegungsverlauf der Masse.

4.1.3 Feder-Masse-Systeme mit drei Schraubenfedern

In einem weiteren Beispiel wird ein System mit drei Federn betrachtet, welche an ihrem einem Ende symmetrisch um den Ursprung befestigt sind. Die jeweils anderen Enden sind mit einer Masse verbunden. Sie können sich mit der Masse frei bewegen. Der mechanische Aufbau des System ist in Abbildung 4.11 in der Draufsicht dargestellt.

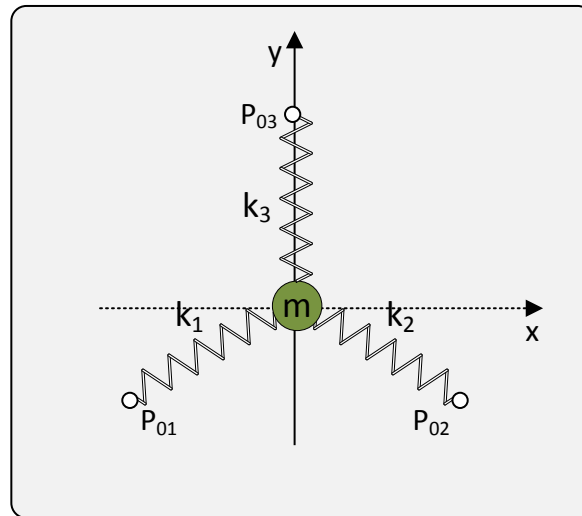


Abbildung 4.11: Mechanische Aufbau eines Feder Masse Systems aus drei Schraubenfedern, die symmetrisch um den Ursprung angeordnet sind.

Die potenzielle Energie ergibt sich wie bei den vorangegangenen Beispielen durch die Überlagerung der Einzelenergien zu:

$$E_{pot}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left\{ \begin{aligned} &k_1(-l_1 + \sqrt{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2})^2 \\ &+ k_2(-l_2 + \sqrt{(x - x_2)^2 + (y - y_2)^2})^2 \\ &+ k_3(-l_3 + \sqrt{(x - x_3)^2 + (y - y_3)^2})^2 \end{aligned} \right\}. \quad (4.6)$$

Die Systemparameter sind: $m = 1 \text{ kg}$; $k_1 = k_2 = k_3 = 2 \cdot \pi \cdot m = 6,283 \frac{\text{kg}}{\text{s}^2}$; $l_1 = l_2 = l_3 = 2 \text{ m}$. Die Koordinaten für die Befestigungspunkte der Federn sind:

$$\begin{pmatrix} P_{01} \\ P_{02} \\ P_{03} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1,5 & -\frac{3\sqrt{3}}{4} \\ 1,5 & -\frac{3\sqrt{3}}{4} \\ 0 & \frac{3\sqrt{3}}{4} \end{pmatrix} [m] \quad (4.7)$$

Diese Koordinaten ergeben eine symmetrische Anordnung um den Ursprung des Koordinatensystems. Durch diese Anordnung ergibt sich ein globales Energieminimum, welches sich genau im geometrischen Mittel zwischen den Befestigungspunkten befindet. Eine dynamische Simulation mit einer Dämpfungskonstante $d = 50 \frac{kg}{s}$ und einer Startposition der Masse bei $P_{m1} = (-2; 2)[m]$ zeigt Abbildung 4.12. Die Dämpfung entspricht dem aperiodischen Grenzfall. Die Masse „gleitet“ langsam in das Energieminimum. In der Konturdarstellung ist zu erkennen, dass sich die Masse entlang der Kraftfeldlinien bewegt.

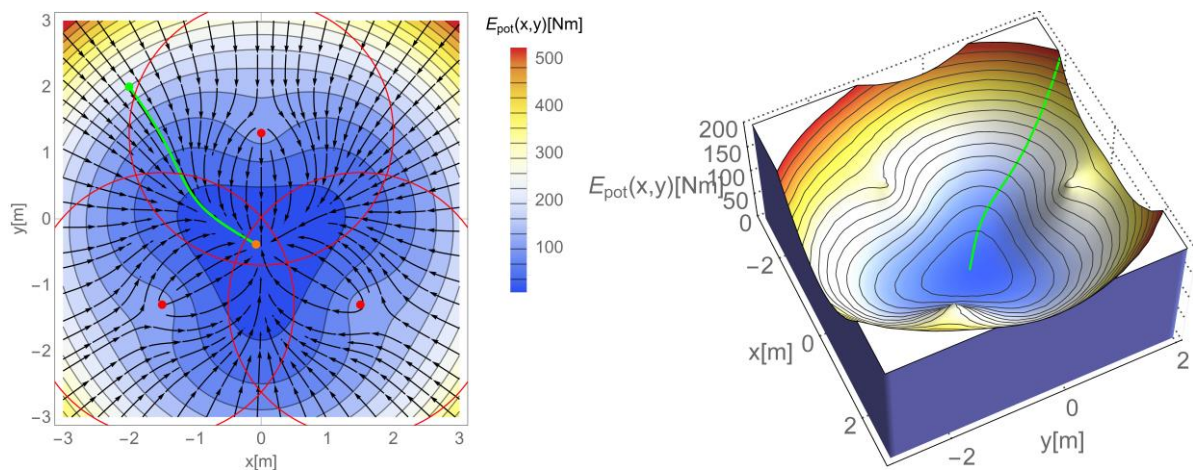


Abbildung 4.12: Die linke Graphik zeigt die Konturdarstellung der potenziellen Energie mit dem Kraftfeld und dem Bewegungsverlauf der Masse. Das rechte Diagramm zeigt das 3D-Energiediagramm zusammen mit dem Bewegungsverlauf der Masse.

4.2 Simulationsbeispiele für Vielteilchensysteme mit Lennard-Jones-Potenzialen

Die im folgenden aufgeführten Simulationen mit Lennard-Jones-Potenzialen werden interessante Verhaltensweisen aufgezeigt. Es folgen Aussagen über die Leistungsfähigkeit der Simulationen. Dabei wird stets **ab initio** (einheitenlos) gerechnet. Eine quantitative Validierung der Simulationen, wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt. Im Fokus stehen die Mechanismen der Selbstorganisationsprozesse. Eine Validierung der Systeme wird a posteriori qualitativ durchgeführt. Für die Modellrechnungen wird, wie bereits in Kapitel 3.1.1 „*Simulationsalgorithmen für das Lennard-Jones-Potenzial*“, das Lennard-Jones-12,6-Potenzial gewählt. Es gelten die folgenden Parameter:

$$\begin{aligned}\alpha &= 2 \\ \beta &= 1 \\ m &= 6 \\ n &= 12\end{aligned}\tag{4.8}$$

Diese Parameter gelten für alle nachfolgenden Simulationen und für alle Teilchen. Durch diese Parameterwahl ist der Bindungsabstand $r_0 = 1$, welches die Verifikation erheblich vereinfacht. Da die gesamten Simulationen **ab initio** gerechnet werden, handelt es sich um Potenziale und nicht, wie bei den zuvor beschriebenen Simulationen mit den harmonischen Potenzialen, um potenzielle Energien. Das Lennard-Jones-Potenzial, mit dem die Modellrechnungen durchgeführt werden, sei hier noch einmal aufgeführt. Es lautet:

$$U(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N U_i(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\alpha}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^m} + \frac{\beta}{|\vec{r} - \vec{r}_i|^n} \right).\tag{4.9}$$

4.2.1 Beeinflussung des Bindungsabstandes durch die Überlagerung von Potenzialen

Das Gesamtpotenzial ergibt sich aus der Überlagerung der Einzelpotenziale. Durch diese Überlagerung verringert sich der Bindungsabstand bei Vielteilchensystemen. Ein System aus 2 Teilchen besitzt exakt den Bindungsabstand r_0 . Besteht das System jedoch aus mehr als zwei Teilchen, vermindert sich der Bindungsabstand. Die Größe des Einflusses ist unmittelbar an die Parameter des Lennard-Jones-Potenzials gekoppelt. Mit den zuvor festgelegten Parametern für das Lennard-Jones-Potenzials ergibt der Bindungsabstand $r_0 = 1$.

Dieser Effekt wird nachfolgend durch den Vergleich unterschiedlich langer Teilchenkettens quantitativ ermittelt. Im Anfangszustand sind die Teilchen mit der Bindungslänge $r_0 = 1$ in einer Reihe angeordnet. Die Verschiebung der Teilchen in y -Richtung ist bei allen Teilchen gesperrt. Die Teilchen können sich demnach nur entlang der x -Achse verschieben. Der Schrittweitenfaktor beträgt $\mu = 0,0001$. Bei einer Kette aus **10 Teilchen** ist der sich zwischen den Teilchen einstellende Abstand, in Abbildung 3.1 zu sehen. Die y -Achse ist für eine anschaulichere Darstellung beschnitten. Die Anzahl der Iterationen liegt bei 15000. Der größte Gradient des Systems ist $|\vec{\nabla}_{max} U(\vec{r})| = 1 \cdot 10^{-6}$. Der kleinste sich einstellende Abstand beträgt 0.99718 Längeneinheiten. Bei einem System mit **50 Teilchen** verringert sich der Abstand der mittleren Teilchen weiter. Der Abstände, die sich nach 880 Iterationen eingestellt haben, sind in Abbildung 4.14 zu sehen. Nach 40.000 Iterationen beträgt der maximale Gradient $|\vec{\nabla}_{max} U(\vec{r})| = 1 \cdot 10^{-8}$. Die Teilchenabstände sind in Abbildung 4.15 abgebildet. An den beiden gezeigten Graphiken ist der Verlauf zu sehen, wie sich die Teilchen während der Iterationen verschieben. Die Teilchen an den Randbereichen ziehen sich zunächst stärker zusammen als die Teilchen in der Mitte. Die Ursache hierfür liegt an der Symmetrie, die bei den mittleren Teilchen vorliegt. Von beiden Seiten werden diese Teilchen angezogen. Die Kräfte heben sich gegenseitig auf. Erst wenn sich die Teilchen an den Rändern verschoben haben, können die mittleren Teilchen folgen. Der kleinste Abstand beträgt nun 0.99717. Der Vergleich zu dem 10-Teilchen-System, liefert in der 5. Nachkommastelle eine Abweichung.

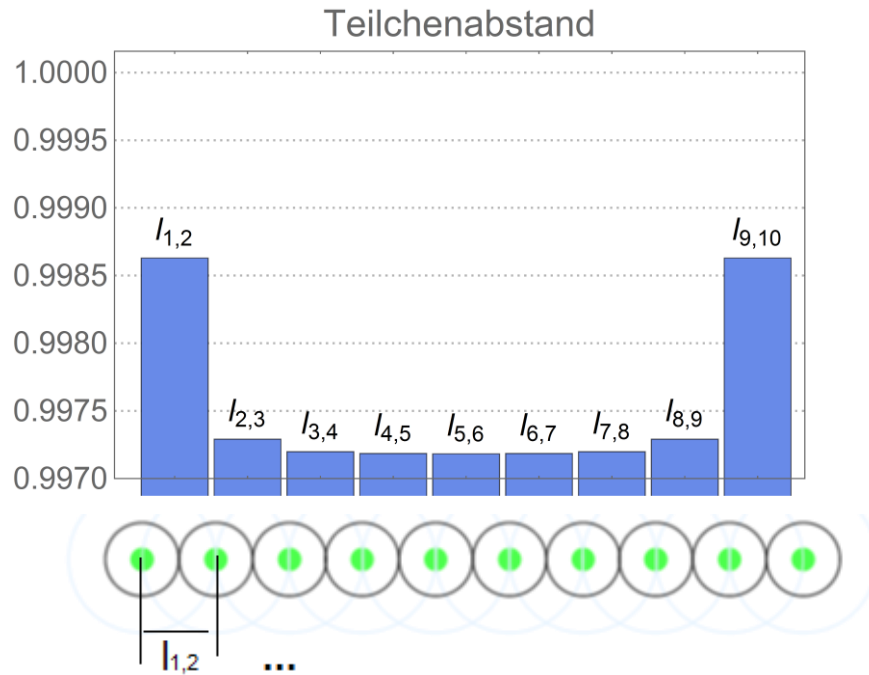


Abbildung 4.13: Abstände, die sich zwischen den Teilchen nach 1500 Iterationen einstellen. Durch die Überlagerung der Potenziale verkleinert sich der Teilchenabstand r_0 .

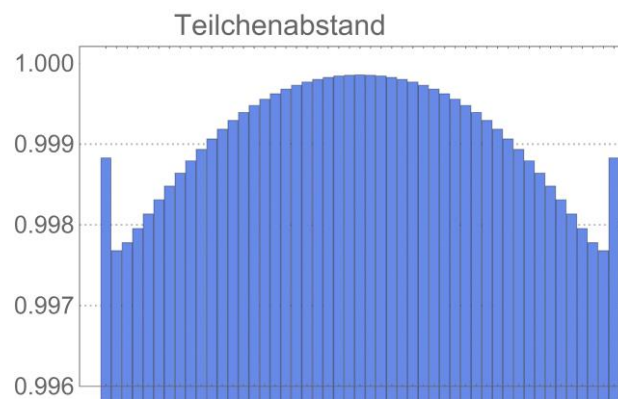


Abbildung 4.14: Abstände, die sich zwischen den Teilchen nach 8800 Iterationen einstellen. Das System ist hier noch nicht konvergiert. Durch die Überlagerung der Potenziale verkleinert sich der Teilchenabstand r_0 .

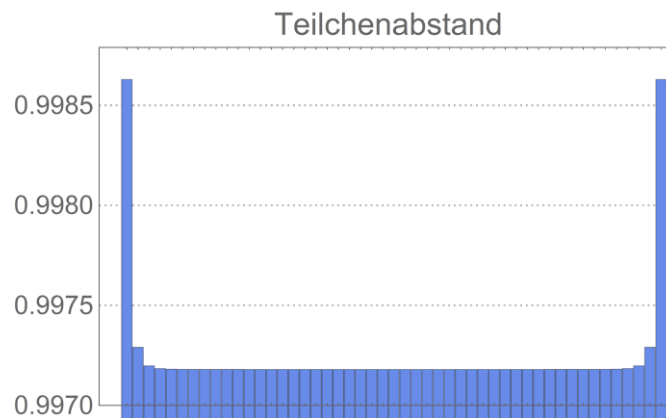


Abbildung 4.15: Abstände, die sich zwischen den Teilchen nach ca. 40.000 Iterationen einstellen. Durch die Überlagerung der Potenziale verkleinert sich der Teilchenabstand r_0 .

4.2.2 Kräfte und Reißlänge einer Teilchenkette im gravitationsfreien Raum

In diesem Beispiel wird gezeigt, wie sich die Reißlängen von Materialien mit dem Lennard-Jones-Potenzial bestimmen lassen. Dazu wird eine 1D-Teilchenkette aus fünf Teilchen im Abstand ihrer Bindungslänge r_0 erstellt. Die Bewegung der Teilchen erfolgt stets entlang der x -Achse (1D-Fall). Die Reißlänge r_w zwischen zwei Teilchen berechnet sich nach Gleichung (2.69). Für die Teilchenkette addiert sich die Reißlänge auf. Für fünf Teilchen ergibt sich die vierfache Reißlänge r_w .

Die Reißlänge zwischen zwei Teilchen beträgt 1.108 Längeneinheiten. Daraus ergibt sich die Gesamtreißlänge von 4.4344. Die Teilchenkette ist im Anfangszustand in Abbildung 4.17 zu sehen. Die Abbildung 4.19 zeigt den Abstand kurz bevor die Kette die Reißlänge überschreitet. Nachdem die Reißlänge überschritten wurde, zieht sich der linke Teil der Kette wieder auf seine ursprüngliche Länge zusammen. Den Zustand, kurz nach dem die Ketten gerissen ist, zeigt Abbildung 4.21. Die erforderliche Kraft berechnet sich aus dem Gradienten an dem Ort der Reißlänge. Ihr Betrag ist 2.68985 Krafteinheiten. Die schwarzen Ringe, die in den Konturdiagrammen auftauchen, entstehen aus den großen Steigungen des Potenzials, wodurch dort sehr viele Äquipotenziallinien dicht nebeneinander liegen.

Die Teilchen, die jeweils zwei Nachbarn haben, liegen in einem deutlich tieferen Potenzialniveau. Sie sind wesentlich stärker gebunden als die beiden außen liegenden Teilchen, da sie von zwei Teilchen umgeben sind. Im Verlauf der Iterationen ist besonders in den 3D-Potenzialdiagrammen zu erkennen, dass die Teilchen aus ihrem statischen Minimum angehoben werden. Die Energie hierfür wird dem System durch die Verschiebung des rechten Teilchens, zugeführt. Die Summe der zugeführten Energie lässt sich aus der Differenz der gesamten Anfangsenergie und der Endenergie bestimmen.

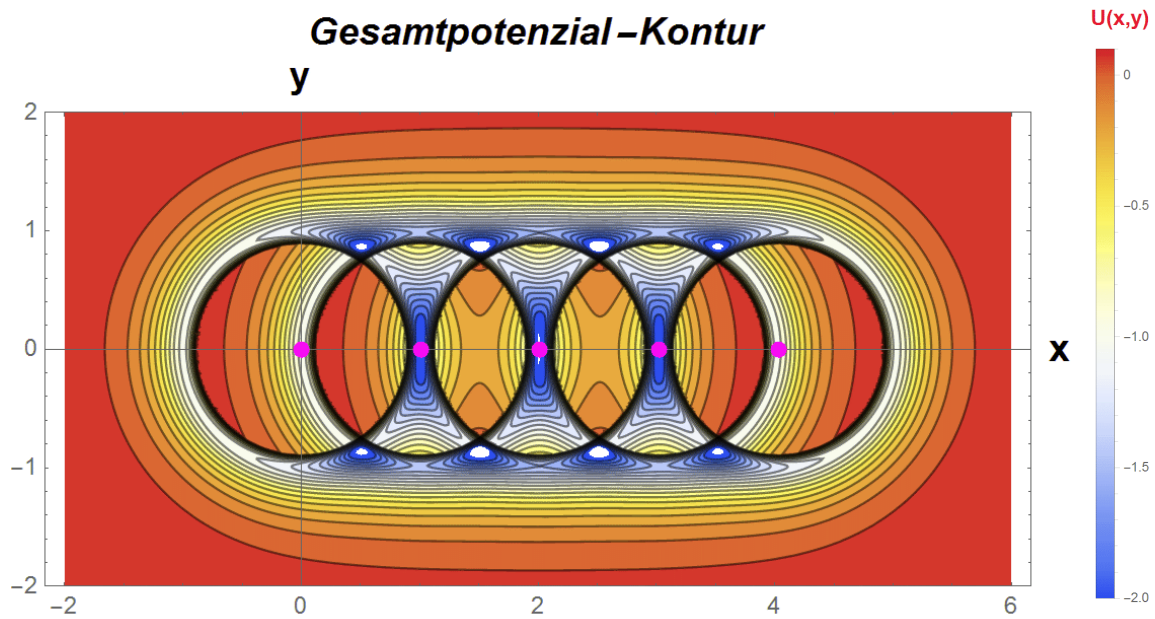


Abbildung 4.16: 1D-Kette aus 5 Teilchen im Anfangszustand. Das Diagramm zeigt das 2D-Potenzialkontur. Die Teilchen befinden sich im dargestellten Zustand in ihren Potenzialminima.

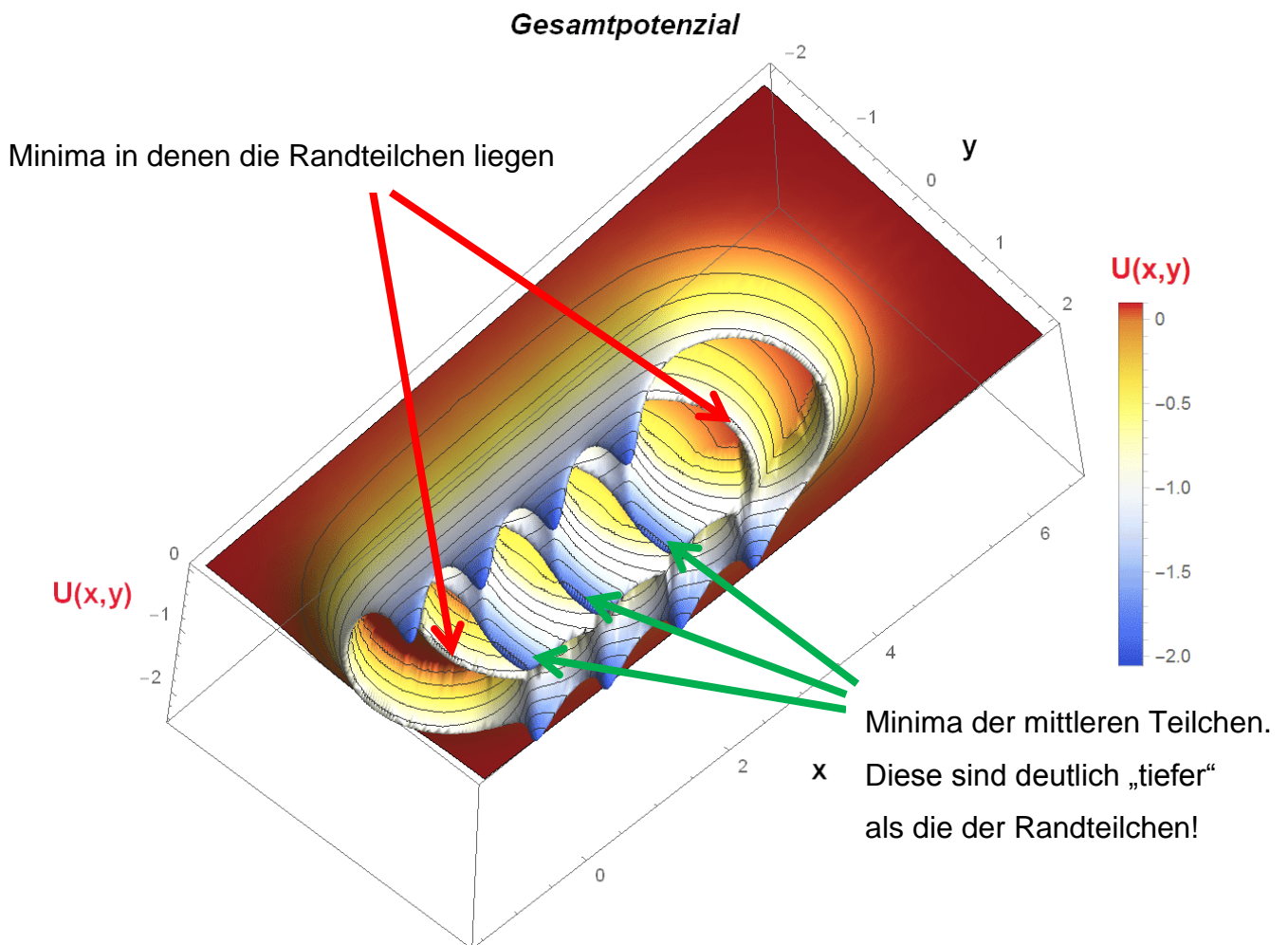


Abbildung 4.17: 1D-Kette aus 5 Teilchen im Anfangszustand. Das Diagramm zeigt das 3D-Potenzial. Die Teilchen befinden sich im dargestellten Zustand in ihren Potenzialminima.

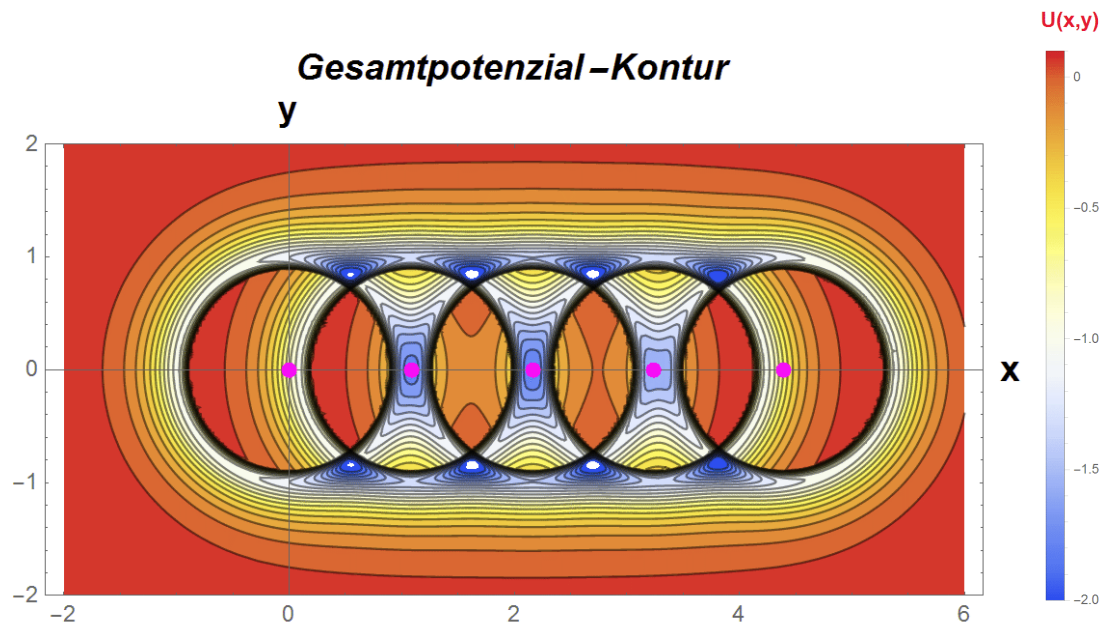


Abbildung 4.18: 1D-Kette aus 5 Teilchen kurz bevor die Kette reißt. Das Diagramm zeigt die 2D-Potenzialkontur. Es ist schon zu erkennen, dass die Teilchen sich nicht mehr ganz symmetrisch ausrichten (zweites Teilchen von rechts).

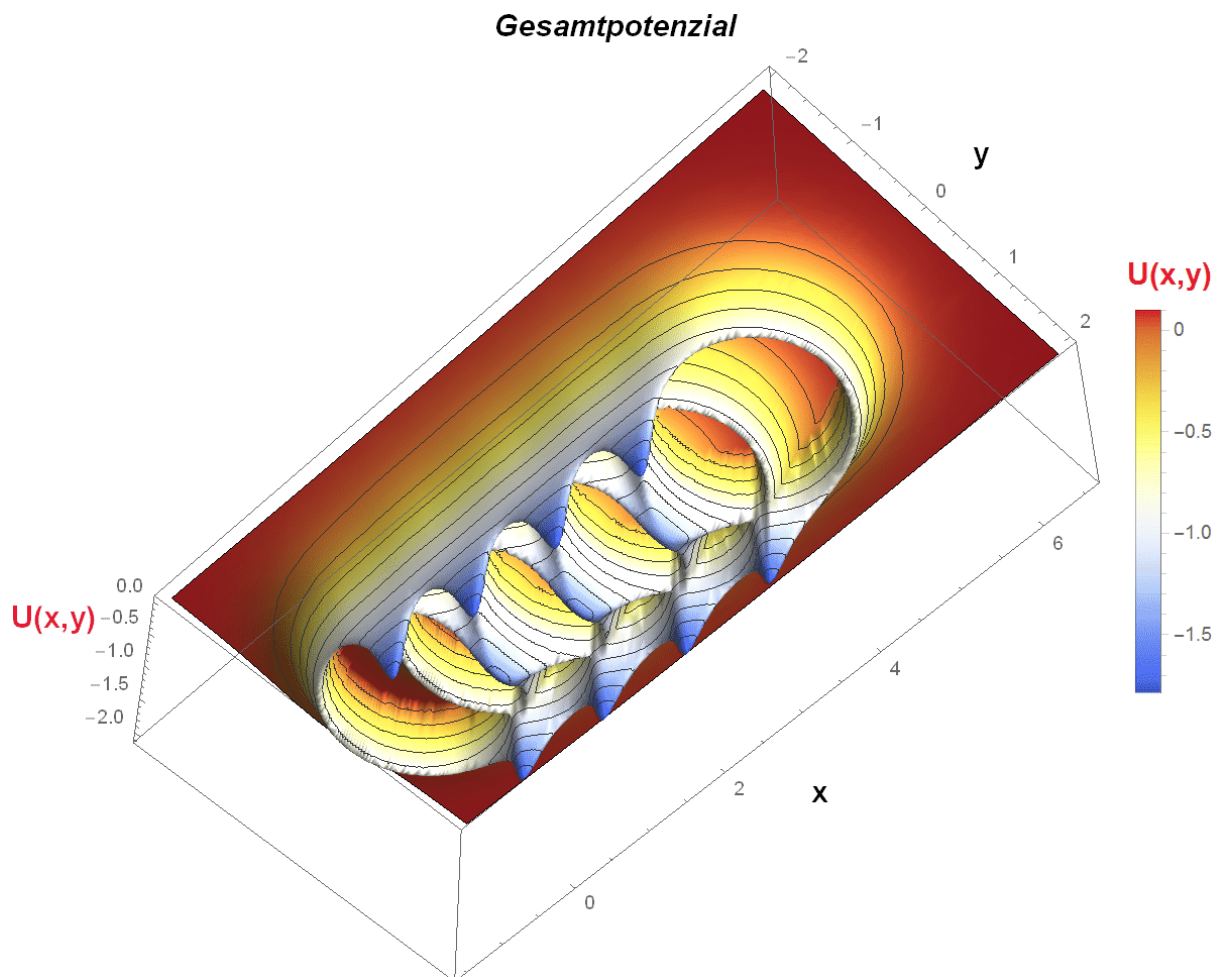


Abbildung 4.19: 1D-Kette aus 5 Teilchen kurz bevor die Kette reißt. Das Diagramm zeigt die 3D-Potenzial-Ansicht. Es ist schon zu erkennen, dass die Teilchen sich nicht mehr ganz symmetrisch ausrichten (zweites Teilchen von rechts).

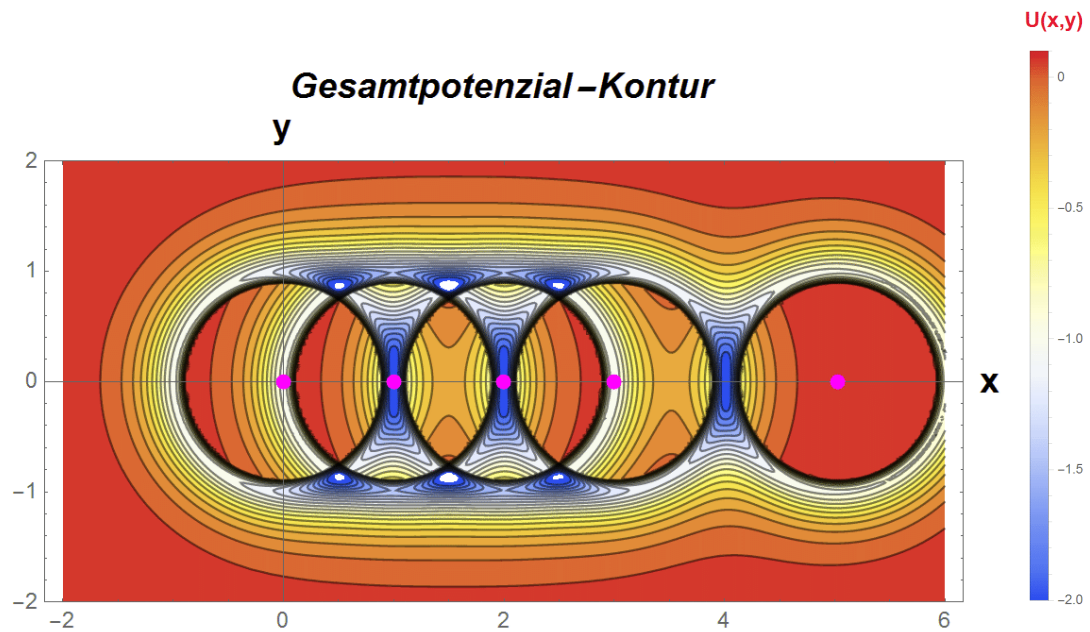


Abbildung 4.20: 1D-Kette aus 5 Teilchen kurz nach dem die Reißlänge überschritten wurde. Die linken vier Teilchen ziehen sich wieder auf ihre ursprüngliche Länge zusammen.

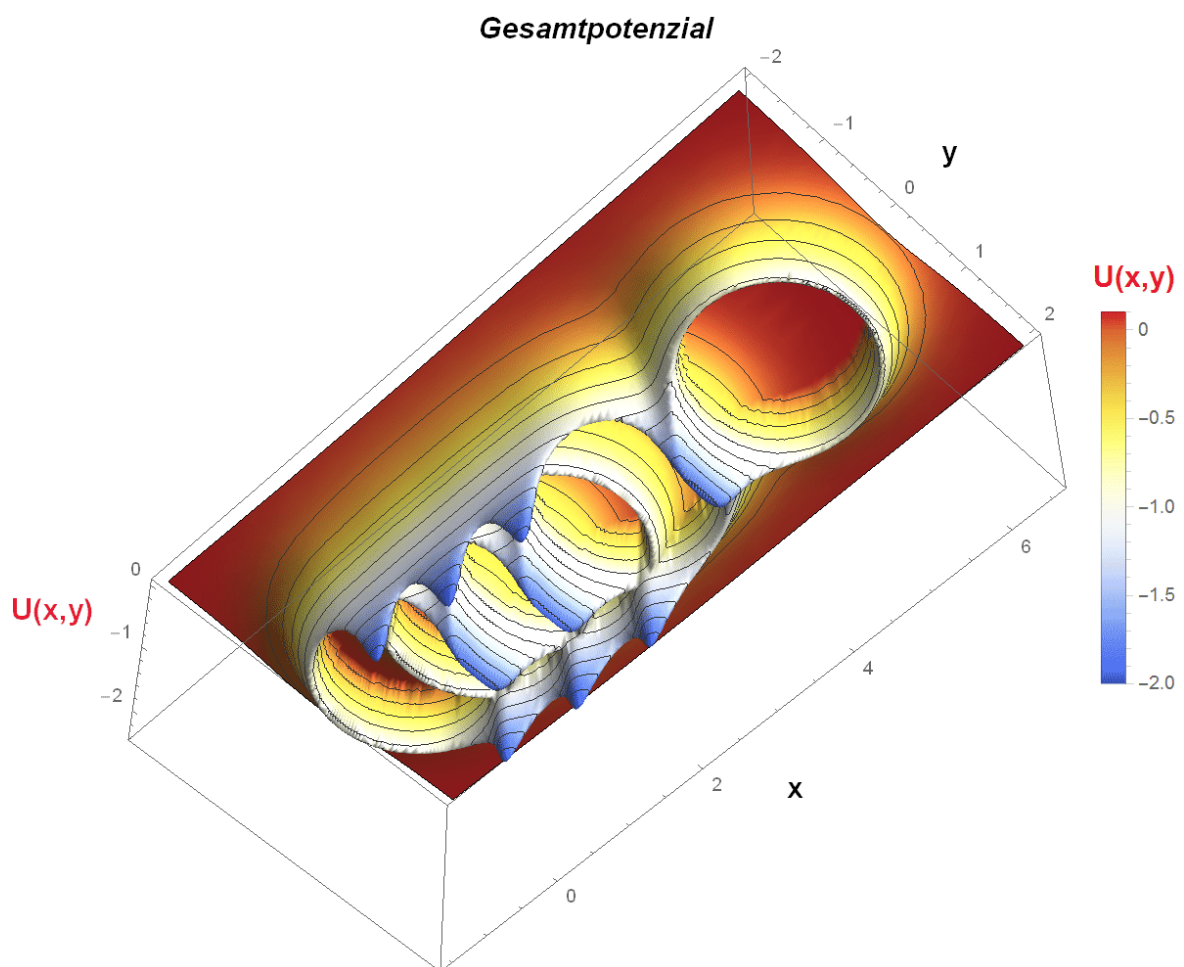


Abbildung 4.21: 1D-Kette aus 5 Teilchen kurz nach dem die Reißlänge überschritten wurde. Die linken vier Teilchen ziehen sich wieder auf ihre ursprüngliche Länge zusammen.

4.2.3 Selbstorganisiertes Verhalten einer Teilchenkette im 2D-Raum

In dieser Simulation wird gezeigt, wie sich eine Teilchenkette verhält, wenn sie sich frei im 2D-Raum bewegen kann. Dabei wird ein Teilchen durch eine induzierte Störung etwas aus der x -Ebene ausgelenkt. Das zweite Teilchen von links wird im Startzustand in y -Richtung auf $y = 0,1$ gesetzt. Außerdem wird der Abstand der Teilchen auf 1,1 festgelegt. Das Teilchen T_{p_2} hat dann die Koordinaten $T_{p_2} = (1,1; 0,1)$. Alle anderen Teilchen liegen auf der x -Achse mit einem Abstand von 1,1 Längeneinheiten. Den Anfangszustand zeigen Abbildung 4.22 im 2D-Potenzialkonturdiagramm und 3D-Potenzialdiagramm. Die Teilchen ziehen sich zunächst auf einer Linie zusammen. Dieser Zustand ist in Abbildung 4.23 einige Iterationen später zu sehen. Eine Faltung ist noch nicht zu erkennen. Erst nachdem sich die Teilchenkette soweit zusammengezogen hat, sodass der Bindungsabstand r_0 zwischen den Teilchen eingestellt hat, fängt die Kette an, sich von rechts ausgehend zu falten. Dies ist zunächst nicht zu erwarten. Durch den erhöhten Teilchenabstand im Anfangszustand kann die Störung des Teilchens an das rechte Ende der Kette übertragen werden. Dies konnte in einer weiteren Simulation bestätigt werden, bei welcher der Teilchenabstand auf 1 gesetzt wurde. Der erste Faltungszustand ist in Abbildung 4.24 dargestellt. Die vollständig gefaltete Kette ist in der Abbildung 4.25. In der Simulation ist außerdem deutlich zu beobachten, dass der Faltungsvorgang ab der ersten Faltung beschleunigt abläuft. Eine Bildfolge der Iterationen zeigen die Graphiken in Abbildung 4.26.

Dieses Beispiel zeigt, wie ein System durch eine Manipulation so beeinflusst werden kann, dass es sich selbstorganisiert neu anordnet. Dieses Prinzip ist die Grundlage des kontrollierten selbstorganisierten Prozesses. Ist das Verhalten von einem System bekannt, können so unter anderem die Strukturen und Topologien gezielt potenzialbasiert gesteuert werden.

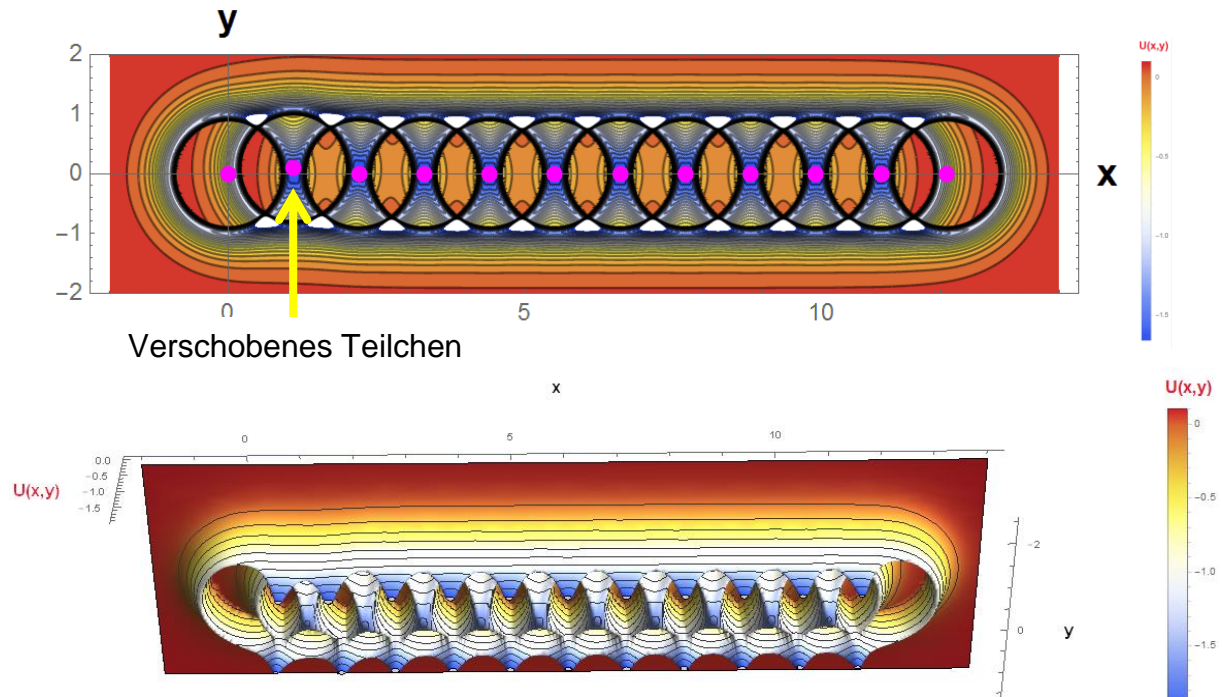


Abbildung 4.22: Anfangszustand einer 2D-Teilchenkette aus 12 Teilchen. Oben ist das 2D Potenzialkonturdiagramm dargestellt, unten das 3D Potenzialdiagramm. Das zweite Teilchen von links ist um 0,1 in positiver y -Richtung verschoben. Die bewirkt eine Störung, die im weiteren Iterationsverlauf zu einer Faltung der Kette führt.

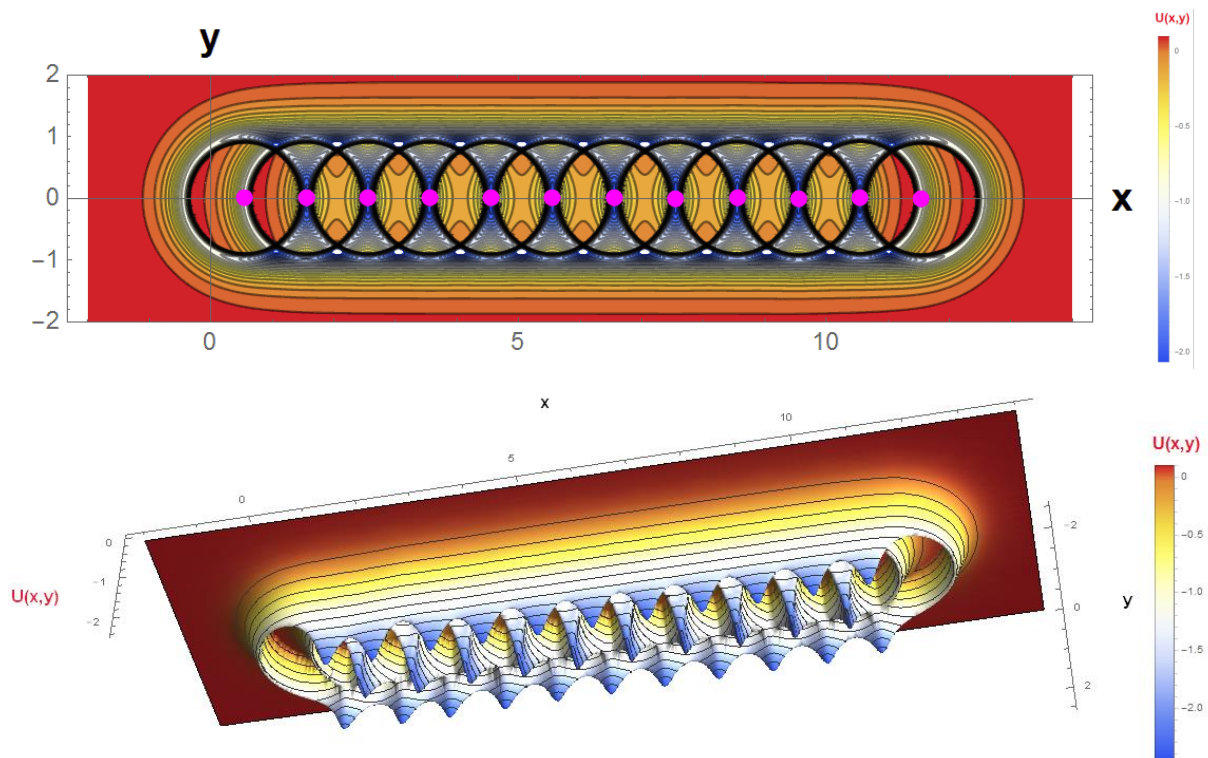


Abbildung 4.23: Zunächst zieht sich die Teilchenkette entlang der x -Achse zusammen, bis alle Teilchen in ihrem Potenzialminimum befinden. Dies ist an der Tiefe der Potenzialminimums besonders deutlich im 3D-Potenzialdiagramm zu sehen.

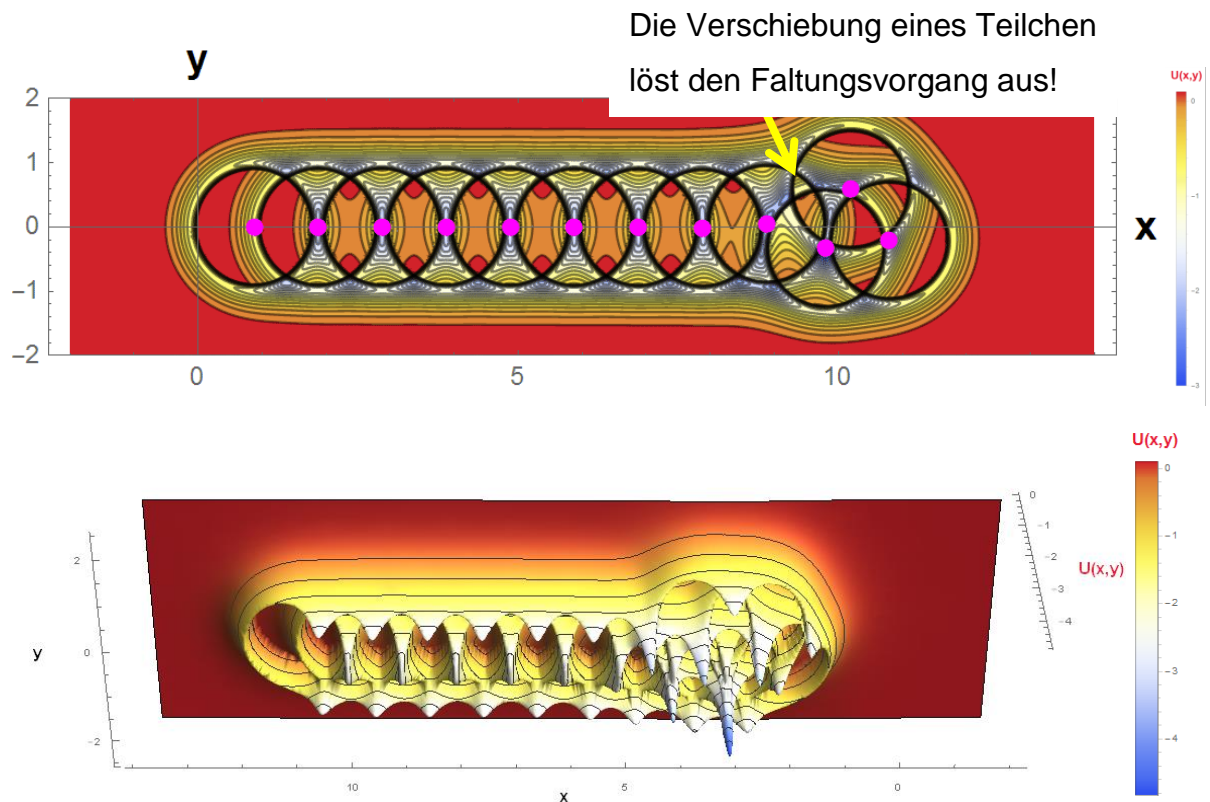


Abbildung 4.24: Durch die Störung eines Teilchens fängt die Kette sich von rechts an zu falten.

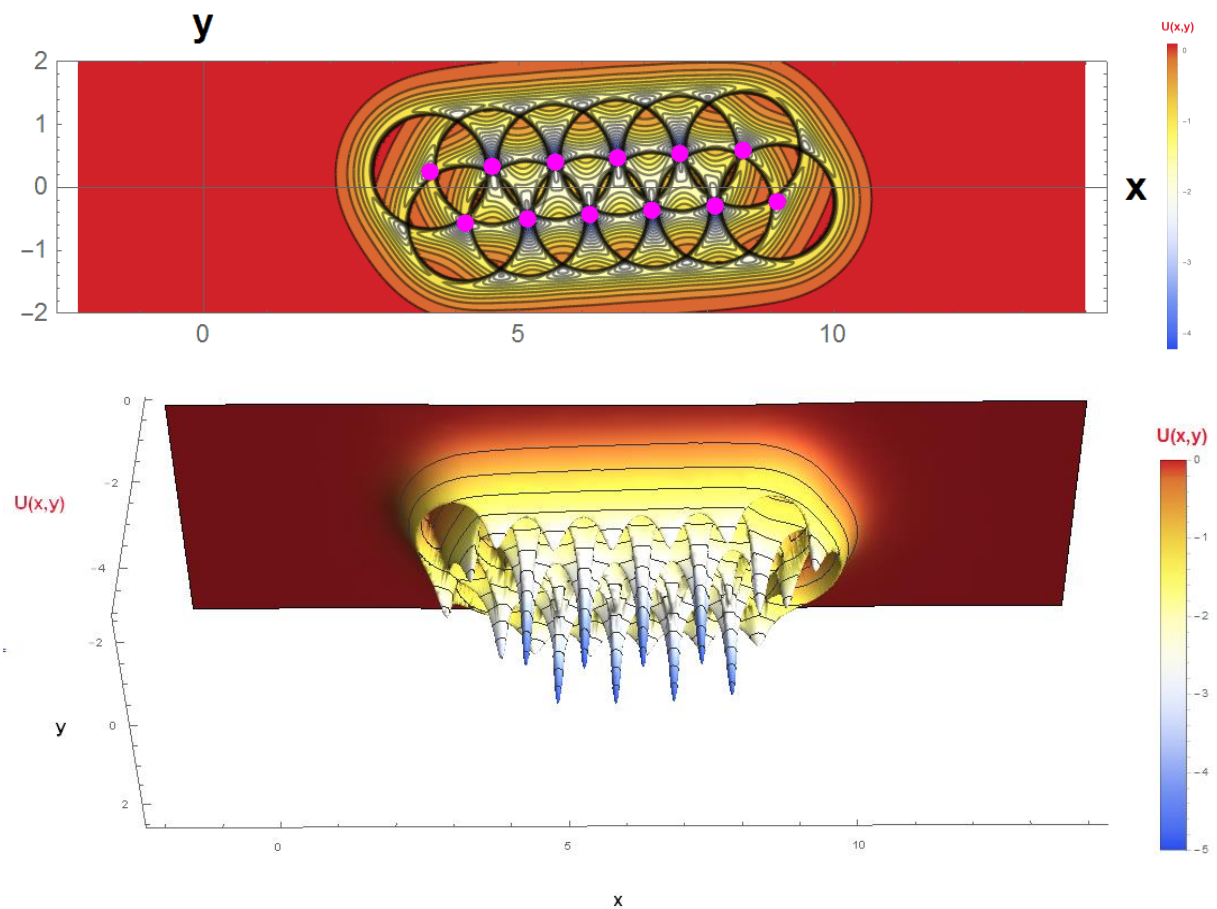


Abbildung 4.25: Im Endzustand hat sich die Kette vollständig gefaltet. Dies ist der energetisch günstigste Zustand, den die Teilchen, bezogen auf ihren Startzustand, einnehmen können.

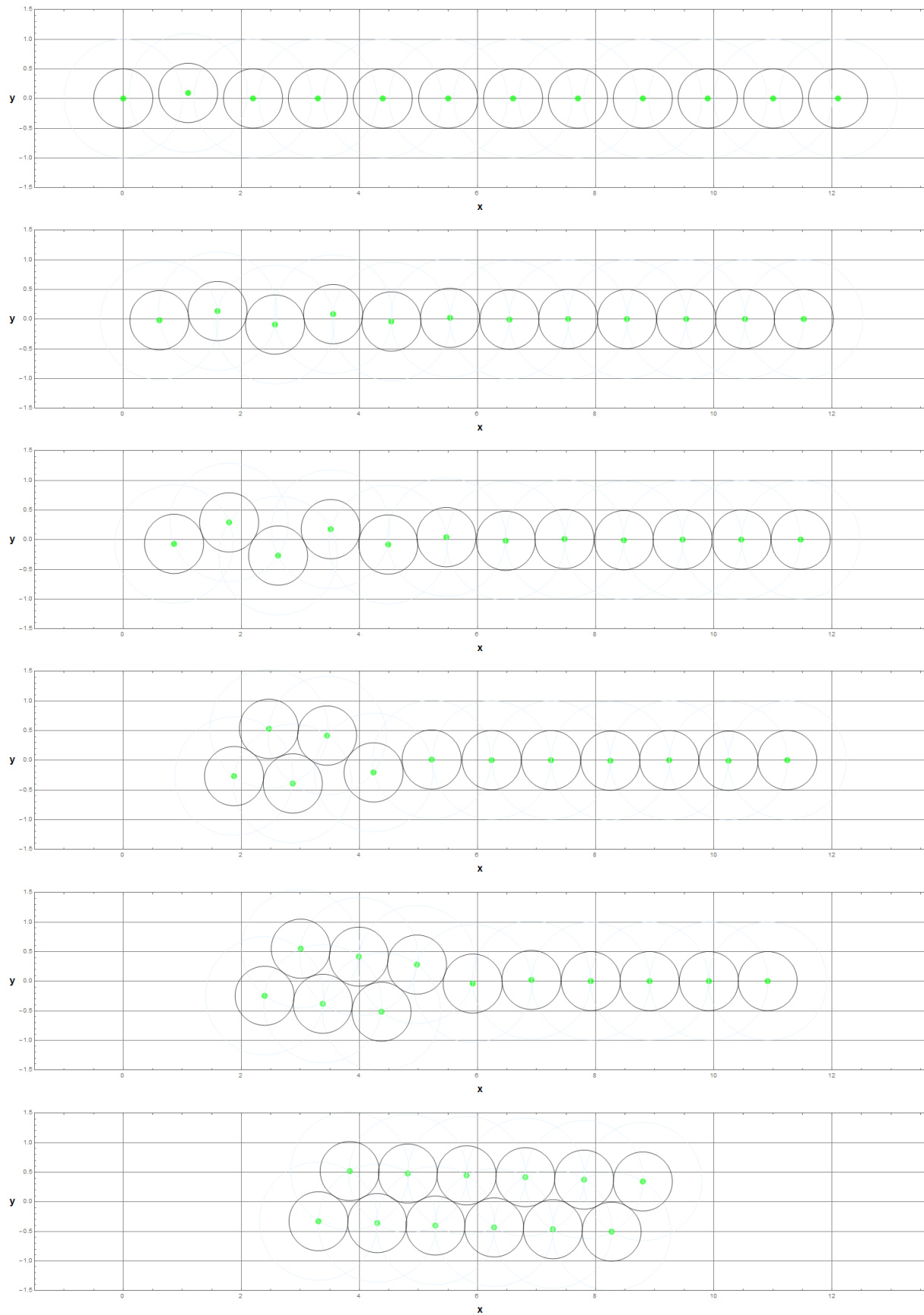


Abbildung 4.26: Die Bilderreihe zeigt den Faltungsverlauf der Teilchenkette.

4.2.4 Teilchenkette im Gravitationsfeld

Wird eine Teilchenkette, die an ihren Enden fixiert ist, einem orts- und zeitkonstanten Potenzial ausgesetzt, wie zum Beispiel dem Gravitationspotenzial, ist zu erwarten, dass sich die Kette an der Richtung des Potenzial orientiert. Das bogenförmige Resultat entspricht einer Kettenlinie, die der Gleichung

$$y = a \cdot \cosh\left(\frac{x - x_0}{a}\right) + y_0 \quad (4.10)$$

gehört. Die Kettenlinie entsteht durch eine Kette aus Massepunkten, welche durch ideale, reibungsfrei Gelenke verbunden. Die beiden Enden sind fixiert und die Kette richtet sich aufgrund des Gravitationspotenzials, dass auf die Massepunkte eine Kraft, gemäß der oben genannten Gleichung aus. Durch die bogenförmige Ausrichtung treten außerdem Kräfte auf, die auch schon beim vorangegangenen Beispiel, zur Faltung der Kette geführt haben. Eine schematische Darstellung dieser Kräfte ist in Abbildung 4.27 zu sehen.

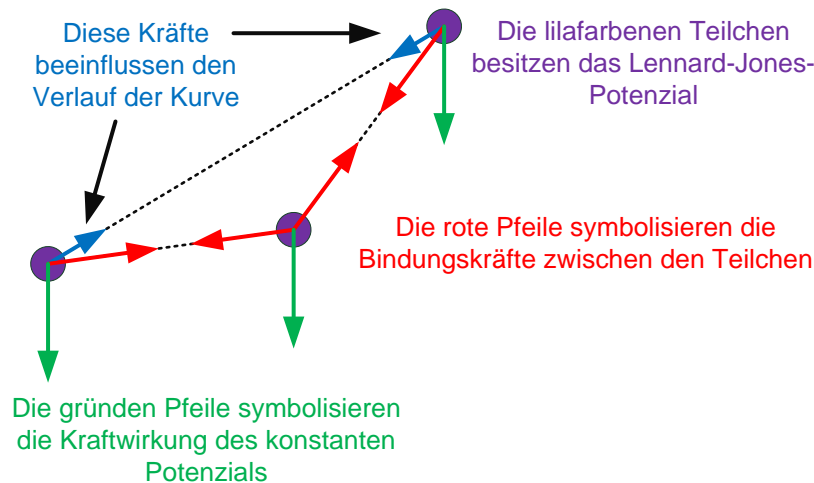


Abbildung 4.27: Kraftwirkung zwischen drei Teilchen in einem konstanten Potenzial. Durch die Wirkung der blau eingezeichneten Kräfte, kann die Kettenlinie nur näherungsweise mit der Simulation abgebildet werden.

Das konstante Potenzialfeld muss bei der Simulation so abgestimmt sein, dass die maximale Bindungskraft des Lennard-Jones-Potenzials nicht überschritten wird. Ist das konstante Potenzialfeld zu schwach, können die blauen Kräfte in der Abbildung 4.27, zu einer Faltung der Kette führen. Für die Simulation werden 20 Teilchen in einer horizontalen Linie angeordnet. Der Teilchenabstand wird etwas kleiner gewählt als der Bindungsabstand r_0 . Das ist notwendig, damit die Kette nicht gespannt ist und

durchhängen kann. Das erste und das letzte Teilchen werden in x - und y -Richtung fixiert. Mit einem konstantes Gravitationspotenzial $U(y) = b \cdot y$ erfährt der Gradient des Gesamtpotenzials in den Kraftkomponenten für x einen Offset. Der Faktor b gibt die Steigung des Potenzials an. In den Simulationen besitzt der Faktor b den Wert $-0,1$. Ein Resultat der Simulationen zeigt die Abbildung 4.28 im 3D-Potenzialdiagramm. Die Abbildung 4.29 zeigt die Teilchen zusammen mit der Kettenlinie. Die Parameter für die Kettenlinie sind:

$$\begin{array}{ll} a = 12.6123 & \text{ } \} \text{Krümmungsradius} \\ \left. \begin{array}{l} x_0 = 8,9299 \\ y_0 = -15.9083 \end{array} \right\} & \text{Verschiebung des Koordinatensystems} \end{array} \quad (4.11)$$

Die Standardabweichung beträgt $\sigma = 0,259 \cdot 10^{-3}$. Auch in diesem Beispiel ist der Selbstorganisationscharakter der Teilchen zu beobachten. Die Manipulation des Systems durch das konstante Gravitationspotenzial bewirkt, dass sich die Teilchen in einer völlig anderen Topologie anordnen.

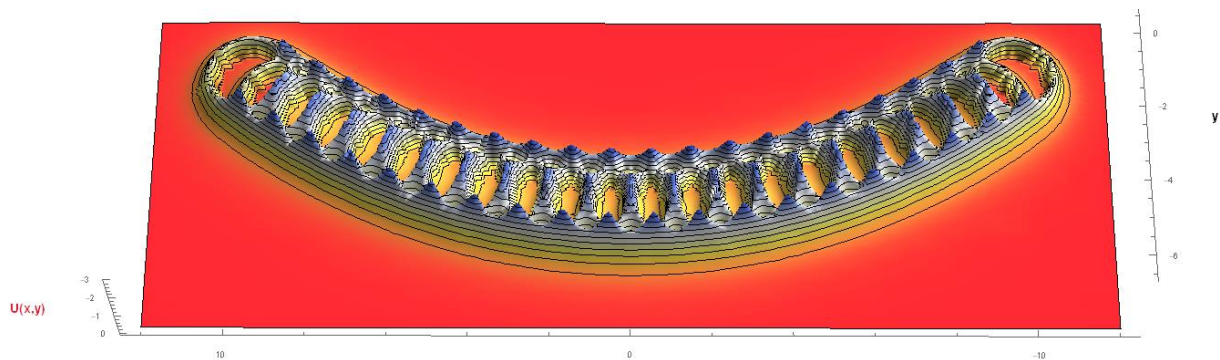


Abbildung 4.28: Endzustand einer Teilchenkette in einem konstanten Potenzialfeld in y -Richtung. Das ganz linke Teilchen und das ganz rechte Teilchen sind in x und y -Richtung fixiert. Durch das konstante Potenzial werden die variablen Teilchen in negativer y -Richtung verschoben.

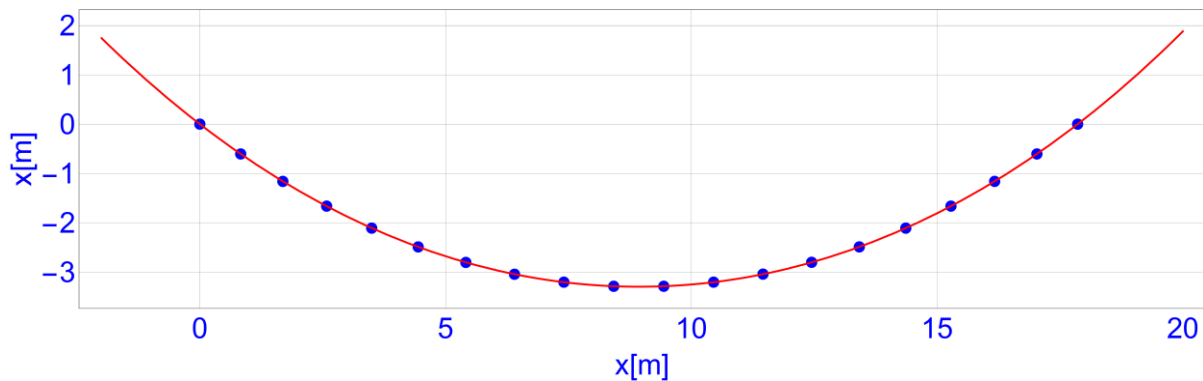


Abbildung 4.29: Die Teilchen nehmen nahezu die Form einer Kettenlinie an.

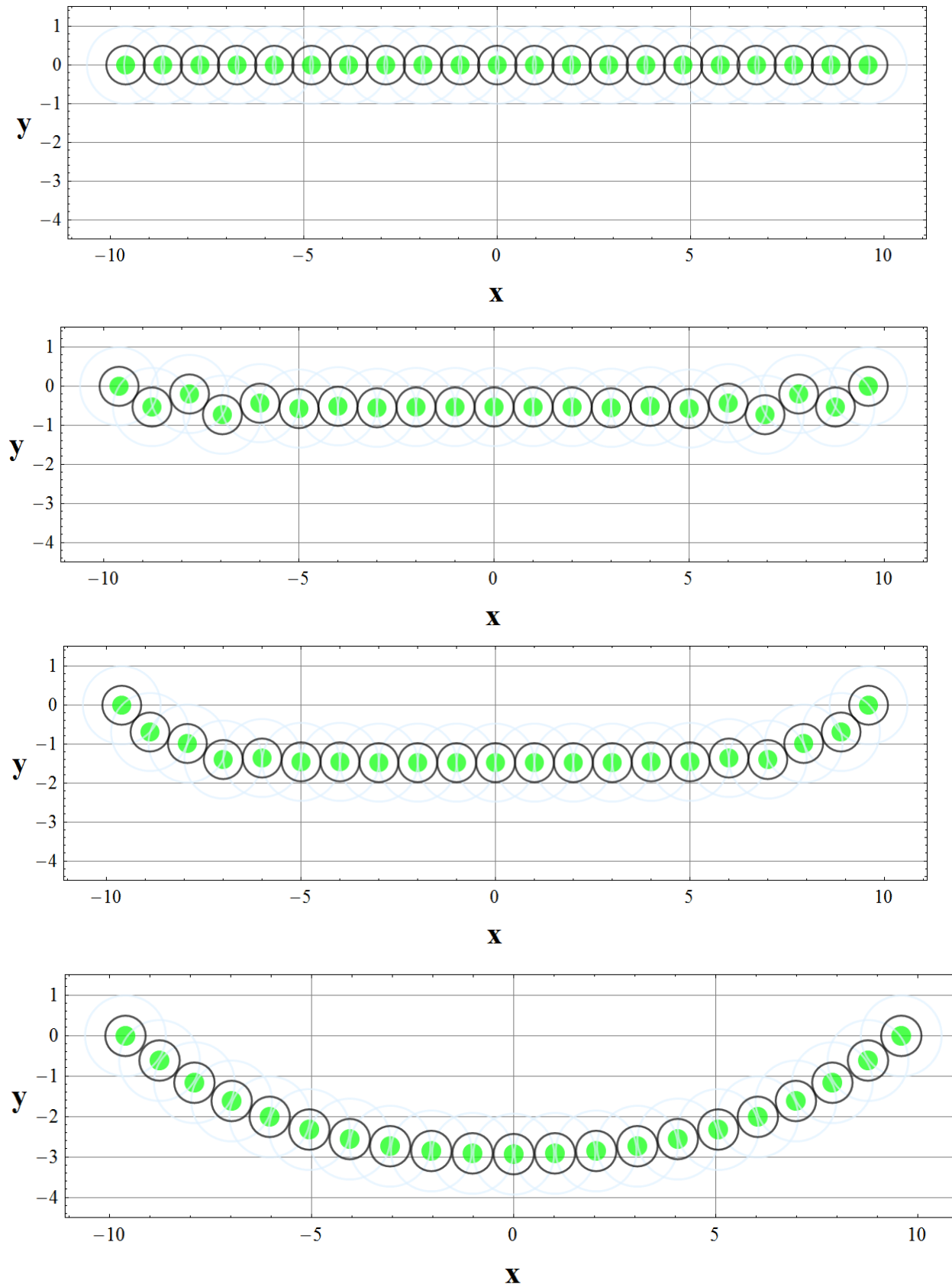


Abbildung 4.30: Die Bilderreihe zeigt den einige Schritte wie sich die Teilchenkette im Schwerfeld ausrichtet.

4.2.5 Selbstorganisierte Entstehung von Mustern und Clustern in Vielteilchensystemen

Wie sich aus einem stochastischen Anfangszustand eine Vielzahl an unterschiedlichen Topologie selbstorganisiert bilden, zeigen die folgenden Simulationen. Dazu werden die Teilchen durch einen Zufallsgenerator in einem begrenzten Raum verteilt. Anschließend richten sich die Teilchen selbstorganisiert aus.

Bei den einfachen Systemen mit 1 bis 5 Teilchen sind der Anordnung der Teilchen zueinander nur wenige Muster möglich. Mit Zunahme der Teilchen werden die Muster und möglichen Resultate immer vielfältiger. Für Systeme aus drei, vier und fünf Teilchen treten nur die in Abbildung 4.31 dargestellten Topologien auf. System mit sechs Teilchen ergeben deutlich mehr Topologien. Diese sind in der Abbildung 4.32 dargestellt. Dabei traten in den Simulationen die linken zwei Muster besonders häufigsten auf. Das rechte Muster hingegen, eines gleichschenkeligen Dreiecks, ist eher selten anzutreffen. Die Ergebnisse eines Systems mit sieben Teilchen zeigt die Abbildung 4.33. Auch hier ist zu beobachten, dass das linke Muster am häufigsten auftritt. Wo hingegen die hexagonale Anordnung, ganz rechts, am seltensten anzutreffen ist. Die

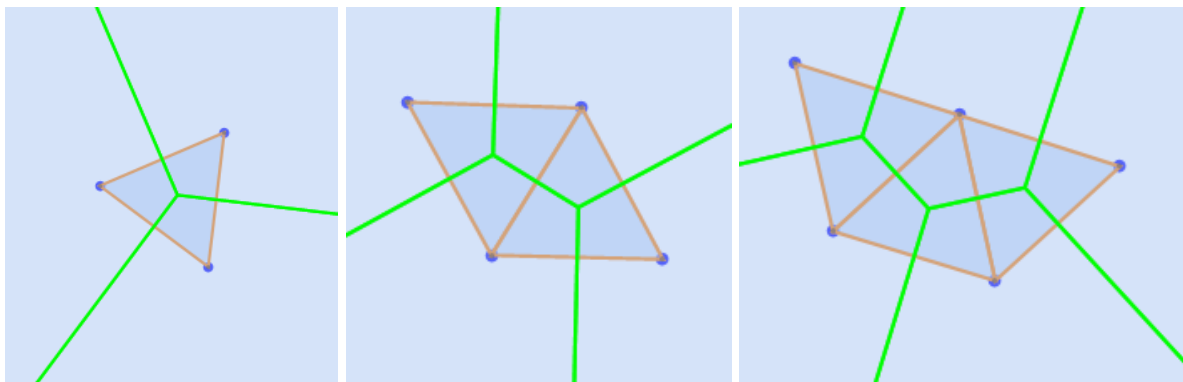


Abbildung 4.31: Anordnung der Teilchen im zweidimensionalen Raum. Bei diesen Systemen treten bei den Simulationen jeweils nur die dargestellten Topologien auf.

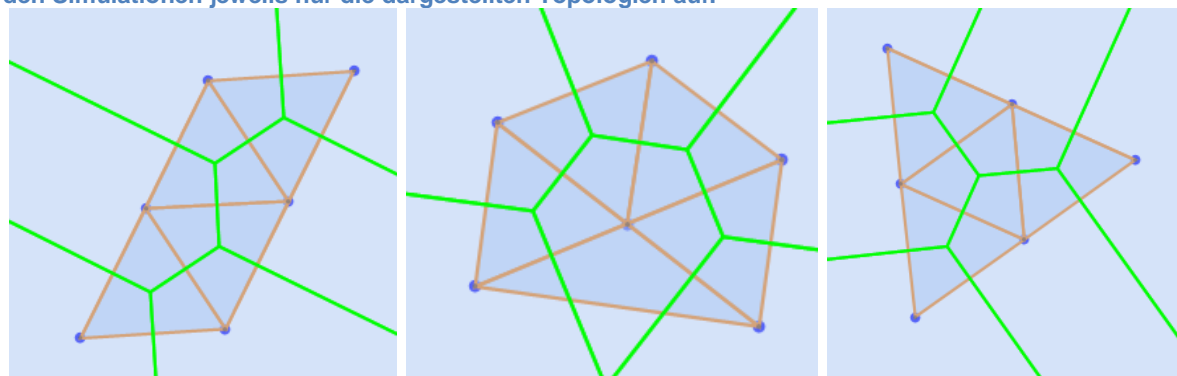


Abbildung 4.32: Anordnung von 6 Teilchen im zweidimensionalen Raum. Die linken beiden Muster wurden in den Simulationen am häufigsten beobachtet. Das rechte Muster hingegen tritt eher selten auf.

Endzustände sind das Ergebnis des Zusammenspiels aus den Eigenschaften der Potenziale und deren Anfangszustand. Das System erreicht dabei nicht immer das globale Potenzial Minimum. In den Graphiken ganz rechts in den Abbildung 4.32 und den Abbildung 4.33 wird das globale Potenzialminimum erreicht. Das heißt im Umkehrschluss, dass sich je nach Startbedingungen auch nur suboptimale Zustände einstellen. Bei Vielteilchensystemen ist die hexagonale Gitterstruktur, wie an dem folgenden Beispiel zu sehen, häufig an zu finden. Fehlstellen im Netz führen zu Verzerrungen und Asymmetrien. Dies ist auch bei realen Kristallen mit Dotierungen zu beobachten. Asymmetrien entstehen in den Simulationen dadurch, dass sich mehrere Cluster bilden, die sich erst später zusammenziehen. Die Teilchen können sich durch Verschränkungen in den Clustern nicht mehr optimal anordnen, sondern nur noch suboptimal.

Das erste Beispiel ist ein System aus **7 Teilchen**, welches sich aus einem ungeordneten Anfangszustand zu einer hexagonalen Einheitszelle ausbildet. Das ist jedoch nicht der allgemeine Fall. In der Abbildung 4.35 sind der Anfangszustand und der Endzustand des Systems dargestellt. Die Potenzialdiagramme zeigen die Abbildung 4.34 und Abbildung 4.36. Es darin sehr gut zu sehen, dass das mittlere Teilchen besonders stark gebunden ist. Dies ist an der „Tiefe“ des Potenzials zu erkennen. Neben dem globalen Minimum des mittleren Teilchens existieren 12 weitere, die symmetrisch um dieses angeordnet sind. Die Minima, welche das mittlere Teilchen direkt umgeben, sind ebenfalls von Teilchen besetzt. Die äußeren Minima sind unbesetzt und entstehen durch die 6 äußeren Teilchenpotenziale. Weitere Teilchen, die dem System zugeführt werden könnten, würden sich in diesen Minima anlagern und wiederum neue lokale Minima ihrerseits generieren.

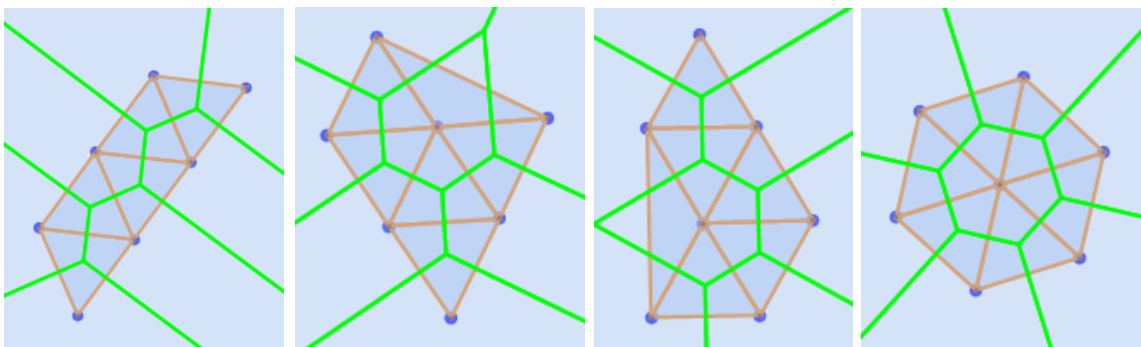


Abbildung 4.33: Anordnung von 7 Teilchen im zweidimensionalen Raum. Beobachtungen in den Simulation zeigen, dass sich das linke Muster am häufigsten bildet. Die drei rechten hingegen sind eher seltener.

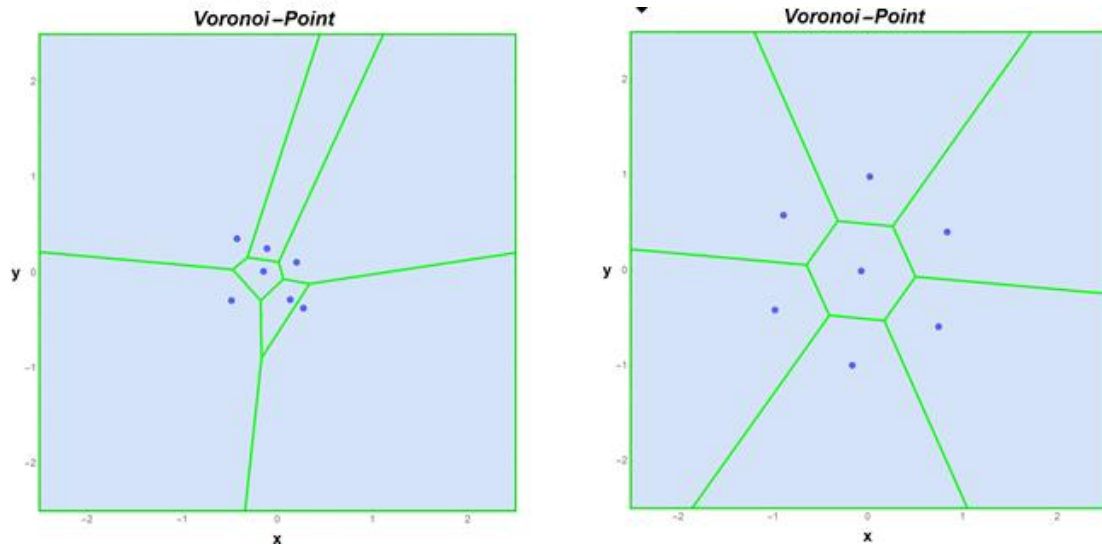


Abbildung 4.35: Aus einem ungeordneten Anfangszustand ordnen sich die Teilchen selbstorganisiert zu einer hexagonalen Einheitszelle an. Diese Musterbildung wurde bei den Simulationen und einem stochastischen Anfangszustand nur selten zu beobachten.

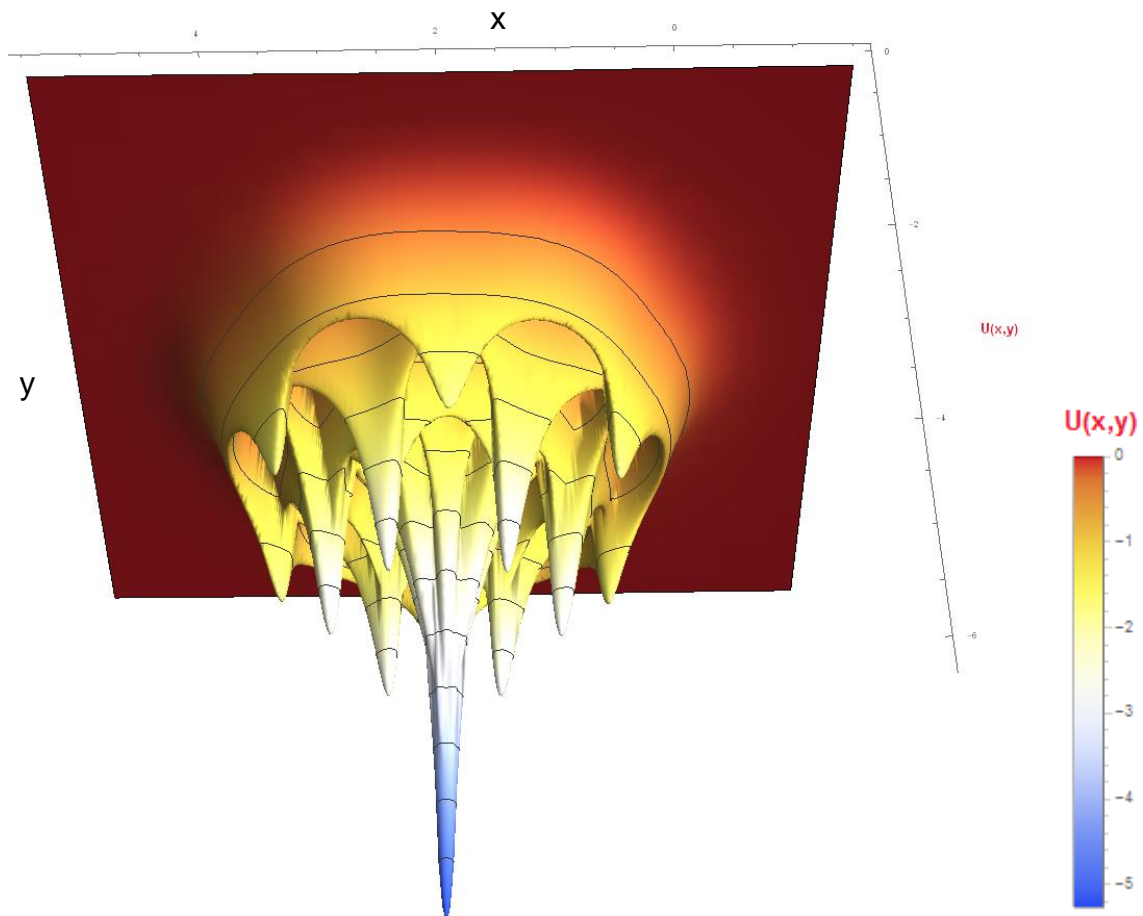


Abbildung 4.34: In dem 3D-Potenzialdiagramm ist sehr gut zu sehen, dass das mittlere Teilchen am stärksten gebunden ist.

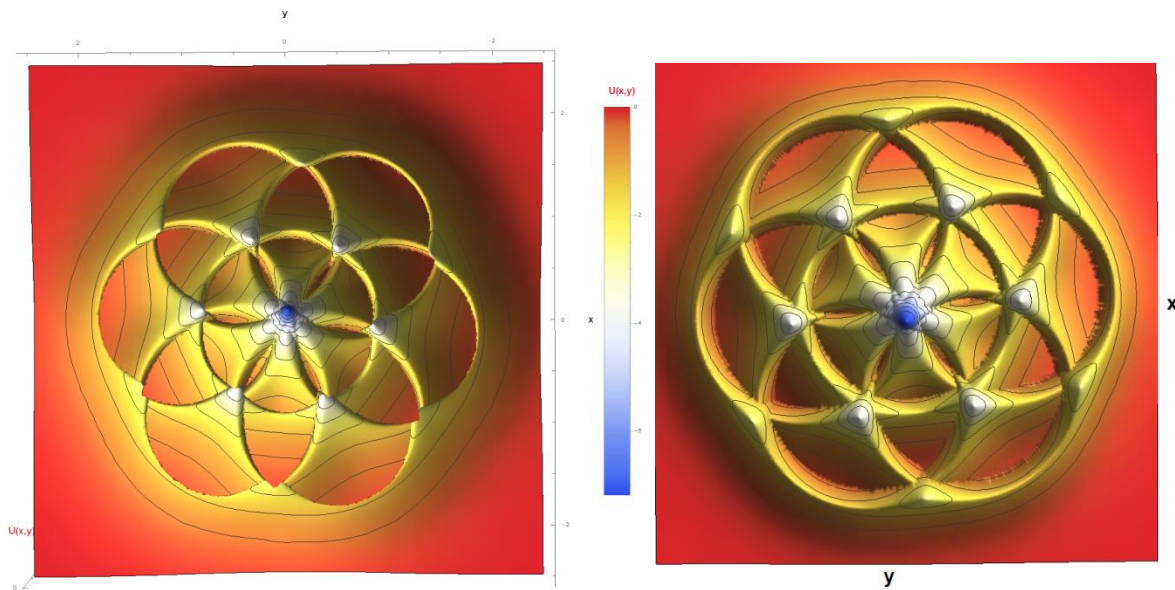


Abbildung 4.36: 3D-Potenzialdiagramm. Das linke Diagramm zeigt das Potenzial von oben, das rechte Diagramm von unten.

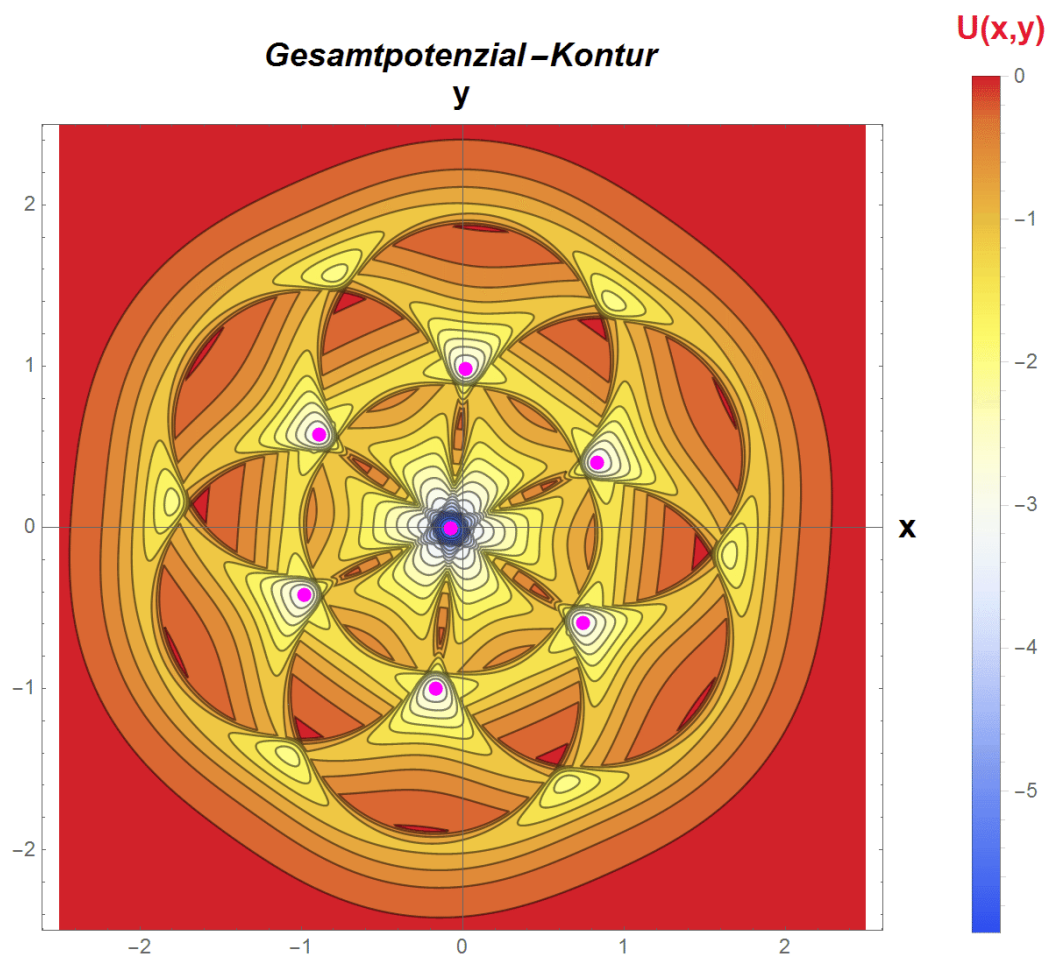


Abbildung 4.37: Endzustand als Konturdiagramm eines Systems mit sieben Teilchen.

Das nächste Beispiel zeigt ein System aus **19 Teilchen**. Es wird wieder von einem stochastisch verteilten Anfangszustand ausgegangen. Die Teilchen werden zufällig in einem quadratischen Bereich von -4 bis 4 verteilt. Der Abstand der Teilchen ist in diesem Zustand kleiner als der Bindungsabstand r_0 . Dies führt in der Simulation dazu, dass keine Fehlstellen auftreten. Die Teilchen ordnen sich gleichmäßig zu einer hexagonalen Struktur an. Eine Clusterbildung, wie sie zuvor schon beschrieben wurde, wird durch den Startzustand verhindert. Der Anfangs- und der Endzustand sind in Abbildung 4.38 zu sehen. Die zugehörigen Potenzialdiagramme zeigen die Abbildung 4.40 und Abbildung 4.41. Das 2D-Konturdiagramm zeigt Abbildung 4.42. Für den gesamten Iterationsverlauf sind bei einem Schrittweitenfaktor $\mu = 0,001$, etwa 5000 Iterationsschritte erforderlich. Den Verlauf des maximalen Gradienten über der Iterationsnummer zeigt die Abbildung 4.39 mit logarithmischer y -Achse.

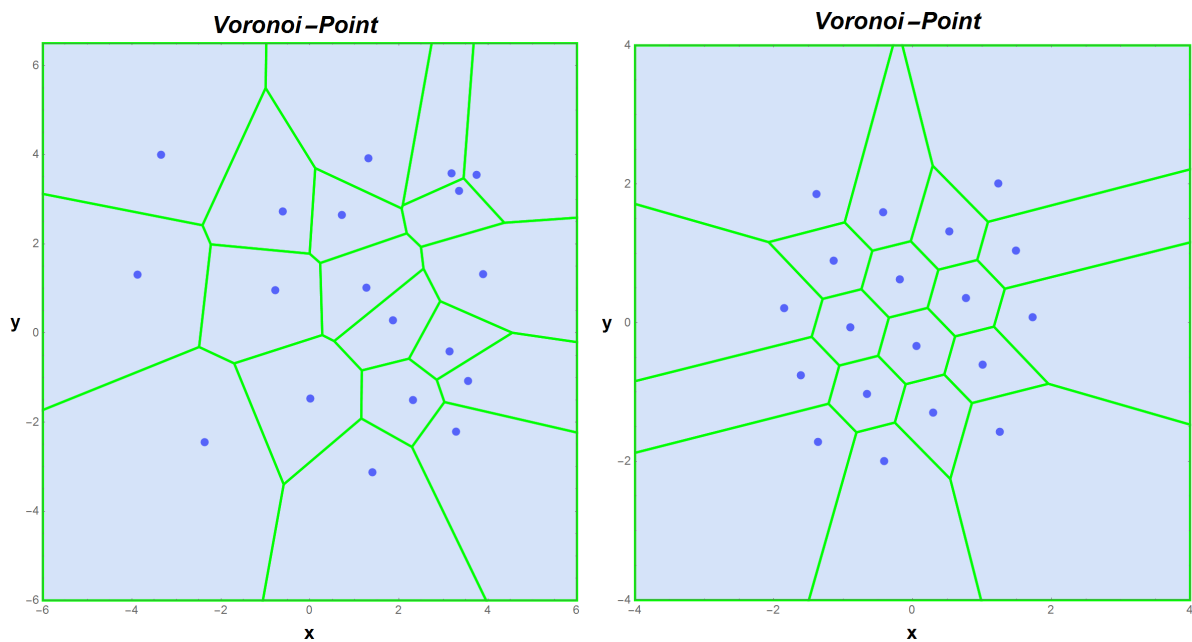


Abbildung 4.38: Aus einem ungeordneten Anfangszustand (links) ordnen sich die Teilchen selbstorganisiert zu einer hexagonalen Gitterstruktur an.

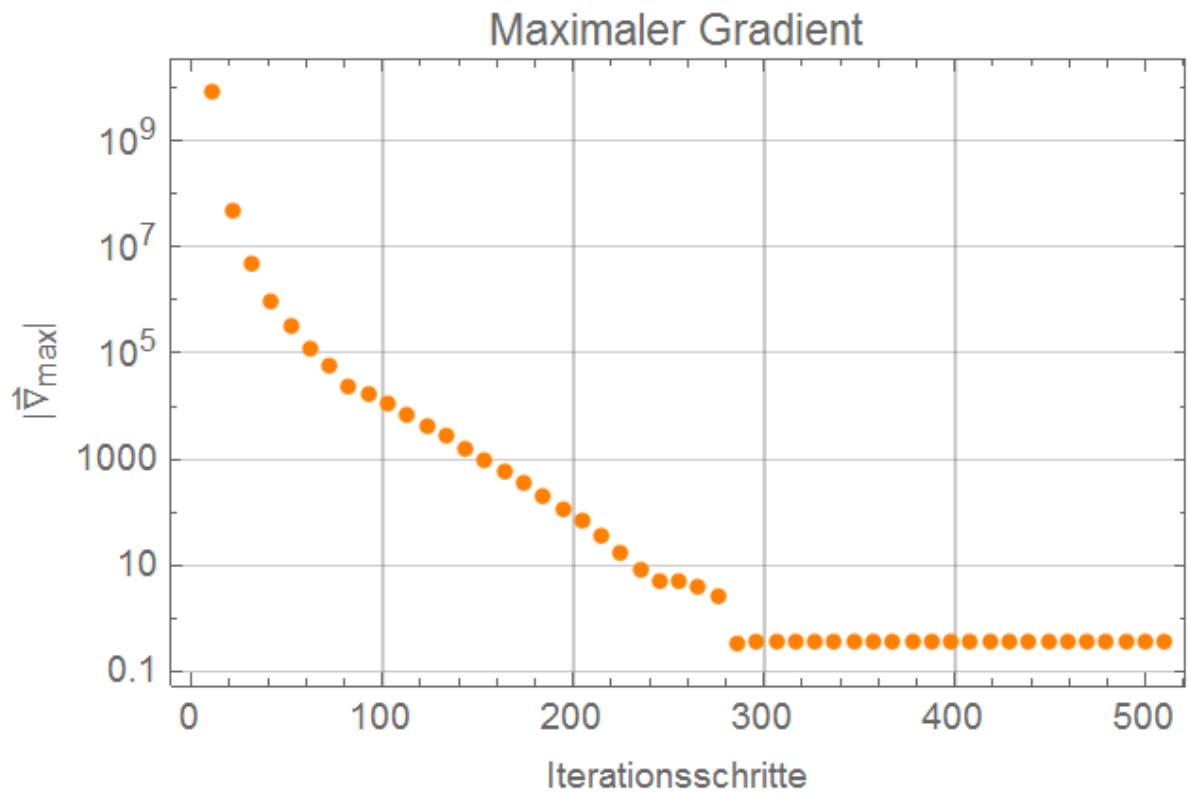


Abbildung 4.39: Maximaler Gradient über der Iterationsnummer (die Anzahl der Iterationsschritte muss mit dem Faktor 10 multipliziert werden!) mit logarithmischer y-Achse.

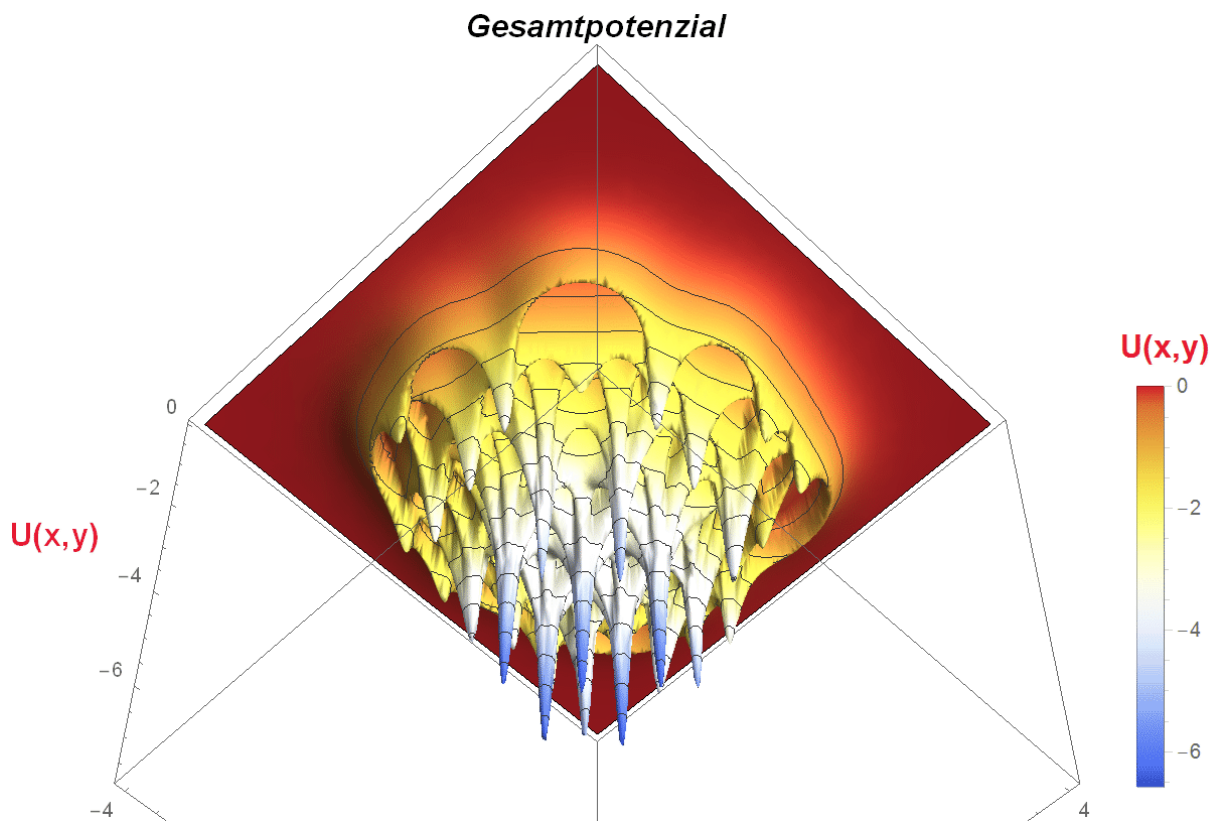


Abbildung 4.40: In dem 3D-Potenzialdiagramm ist sehr gut zu sehen, dass die mittleren Teilchen am stärksten gebunden sind.

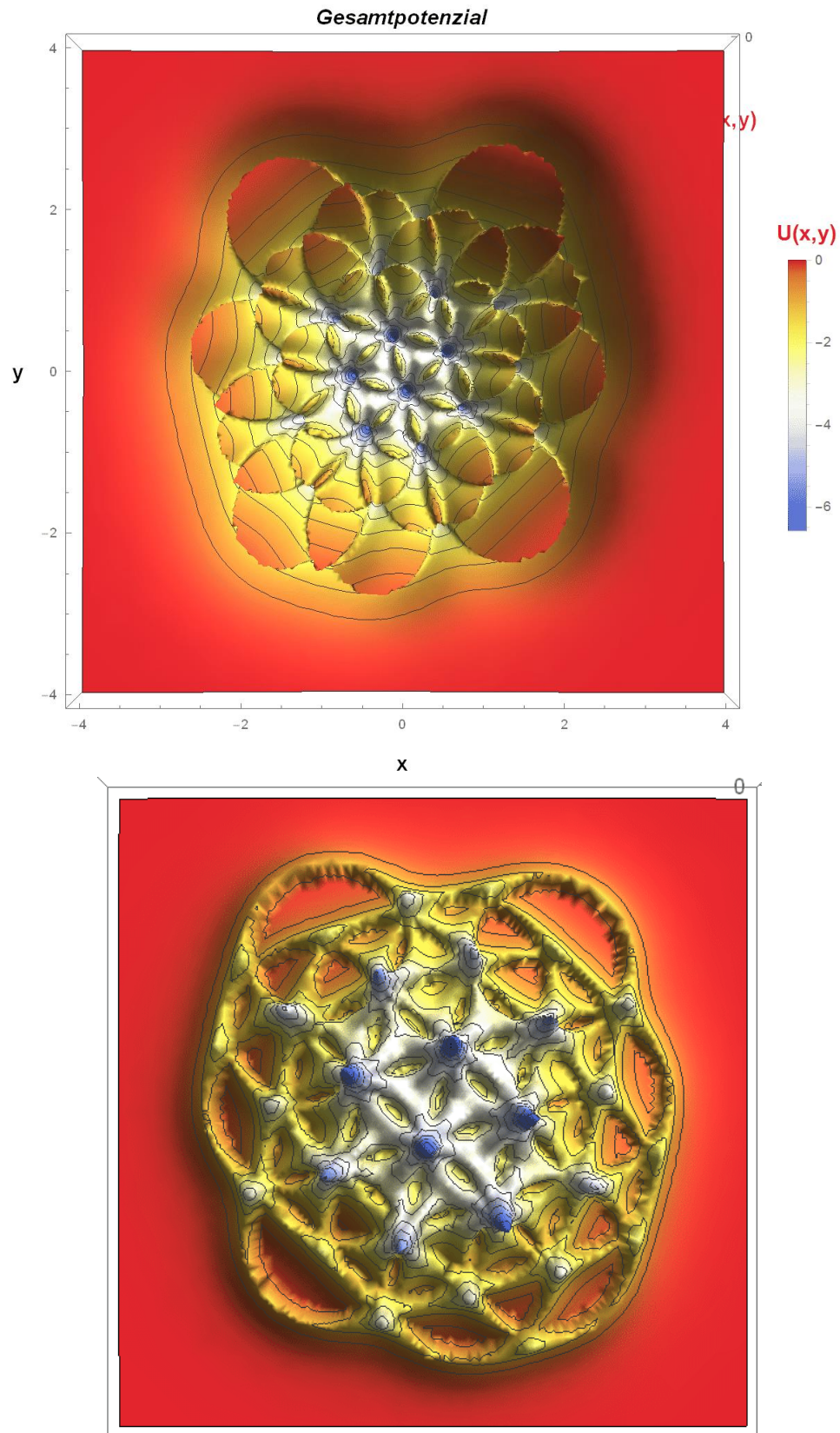


Abbildung 4.41: 3D Potenzialdiagramm. Das obere Diagramm zeigt das Potenzial von oben, das untere Diagramm von unten.

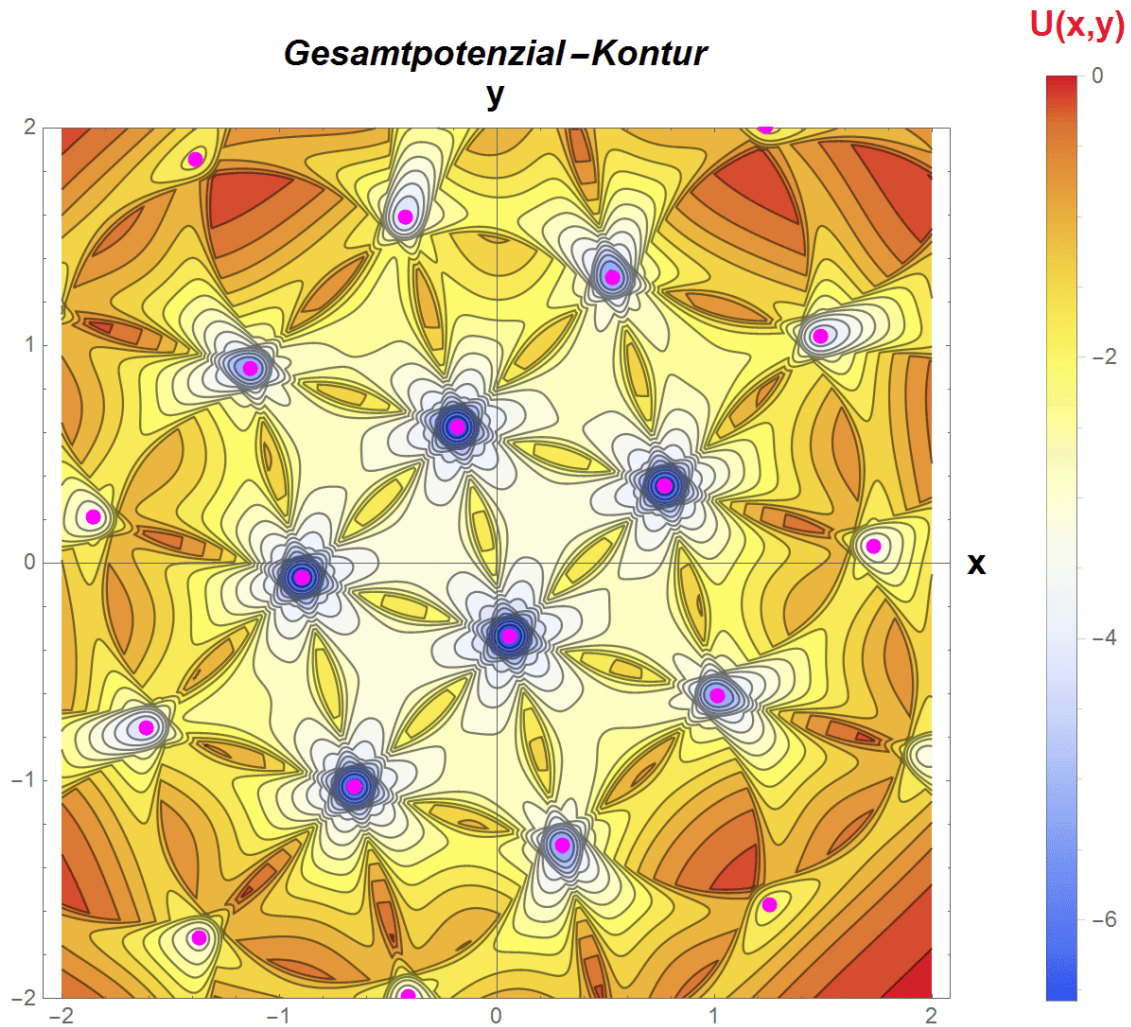


Abbildung 4.42: Endzustand als Konturdiagramm eines Systems mit 19 Teilchen.

Ein System, bei dem eine Clusterbildung zu beobachten ist, besitzt im Endzustand Fehlstellen in der Anordnung (Abbildung 4.43). Die Abbildung 4.44 und Abbildung 4.45 zeigen das Gesamtpotenzial im 3D-Diagramm. Die Verzerrungen durch die Fehlstelle sind im Endzustand des 3D-Potenzialdiagrammes gut zu erkennen.

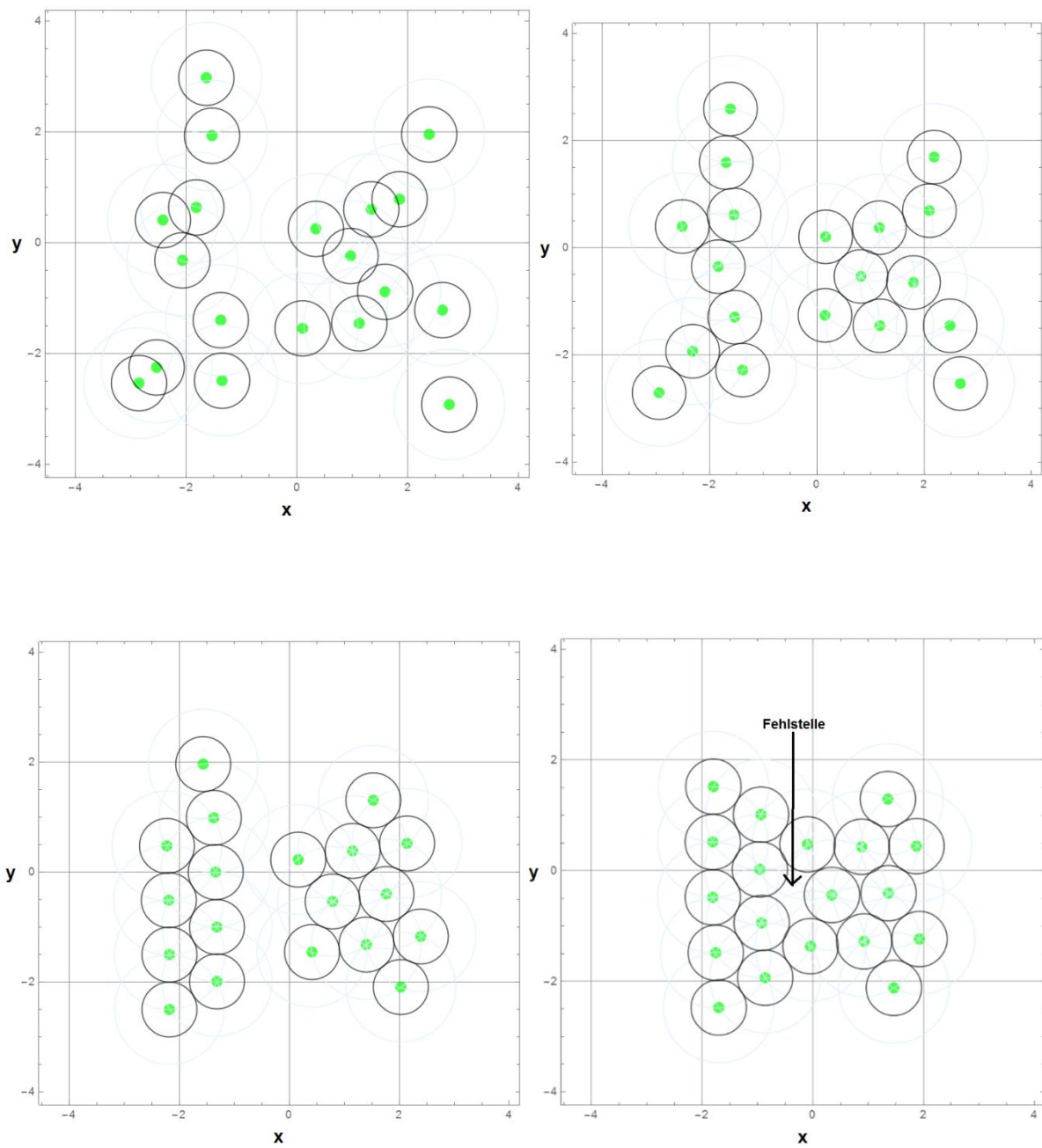


Abbildung 4.43: Aus einem ungeordneten Anfangszustand (oben links), ordnen sich die Teilchen selbstorganisiert zu einer verzerrten hexagonalen Gitterstruktur an (unten rechts).

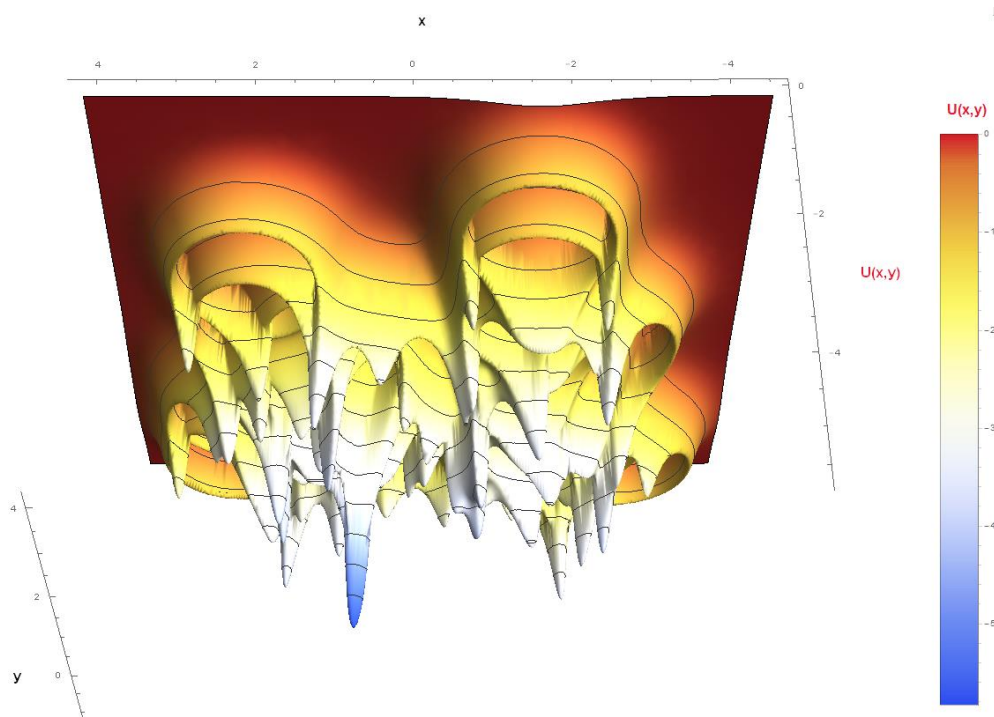


Abbildung 4.44: Das 3D-Potenzialdiagramm zeigt den Anfangszustand mit einer stochastischer Ortsverteilung eines Vielteilchensystems.

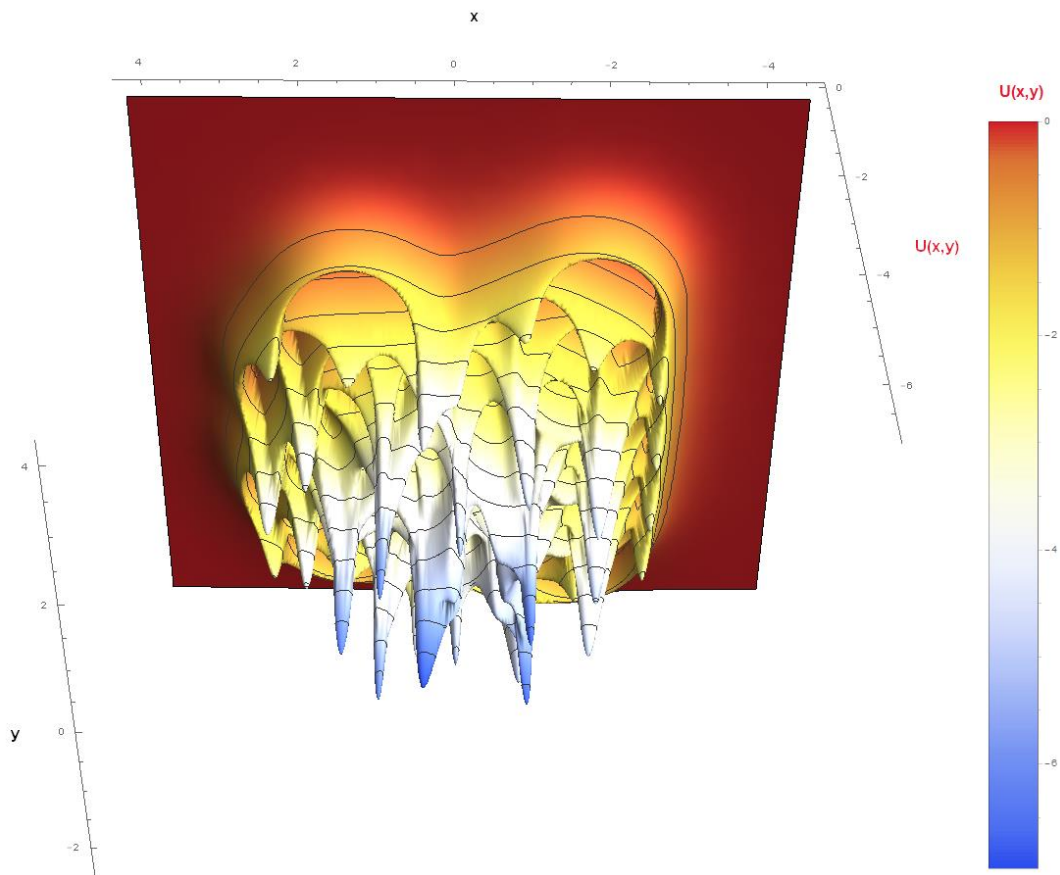


Abbildung 4.45: Das 3D-Potenzialdiagramm zeigt den Endzustand mit einer stochastischer Ortsverteilung eines Vielteilchensystems. Durch die Fehlstelle im System ist deutlich eine Verzerrung im Gesamtpotenzial zu sehen.

4.2.6 Simulation symmetrischer Vielteilchensysteme

Im Gegensatz zu den zuvor aufgeführten Simulationen wird bei der Simulation symmetrischer Vielteilchensystemen von einem symmetrischen Anfangszustand ausgegangen. Die Teilchen werden im Anfangszustand in einer rechteckigen Anordnung gleichmäßig mit einem Abstand von $r_0 \cdot 1,2$ verteilt. Der Anfangszustand eines Systems mit **25 Teilchen** ist in Abbildung 4.46 im linken Diagramm zu sehen. Durch den symmetrischen Anfangszustand befindet sich das System in einem labilen Gleichgewicht. Durch die Überlagerung der Einzelpotenziale ist ein leichter Schrumpfungsprozess zu beobachten. Die oberste Reihe der Teilchen ist für den Endzustand in der Abbildung 4.47 mit verzehrter y -Achse dargestellt. Der Verlauf des maximalen Gradienten des Systems ist in der Abbildung 4.48.

In der Abbildung 4.49 sind die Potenzialniveaus der Teilchen im Anfangs- und Endzustand dargestellt. Im Anfangszustand ist deutlich zu sehen, dass sich die Teilchen, von außen nach innen gesehen, auf unterschiedlichen Potenzialniveaus befinden. Nach der potenzialbasierten Anordnung befinden sich die Teilchen, von außen nach innen gesehen, jeweils auf dem gleichen Potenzialniveau. Die Abbildung 4.50 und Abbildung 4.51 sowie Abbildung 4.52 visualisieren den Endzustand in den Potenzialdiagrammen.

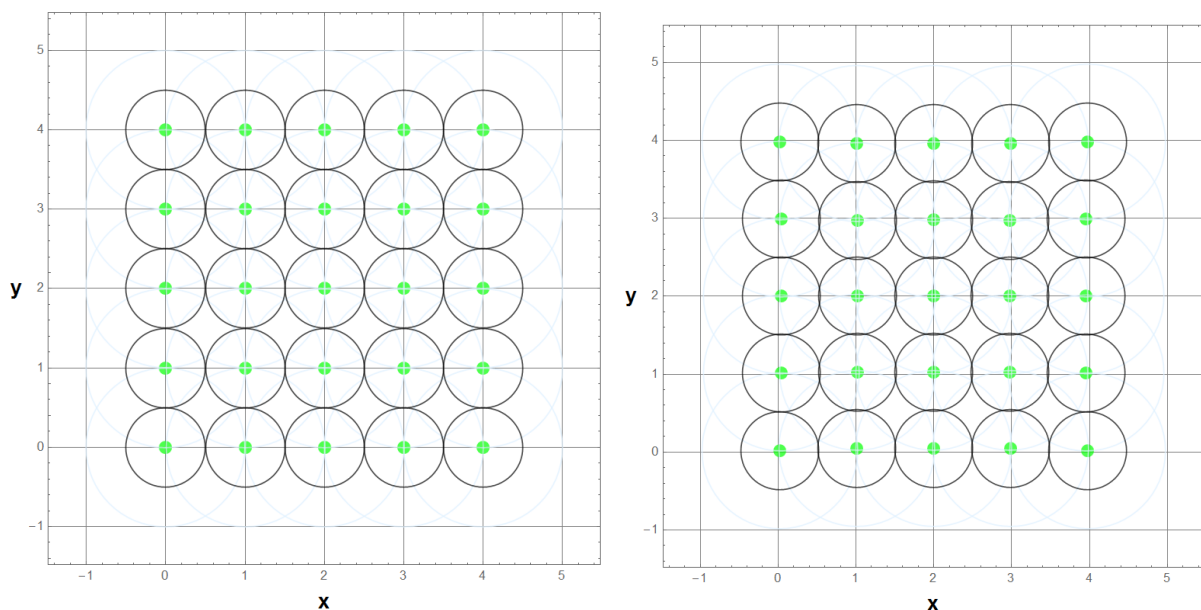


Abbildung 4.46: Ein symmetrisches Teilchensystem links stellt einen labilen Ausgangszustand dar. Das System zieht sich leicht zusammen. Der Endzustand ist in der rechten Graphik abgebildet.

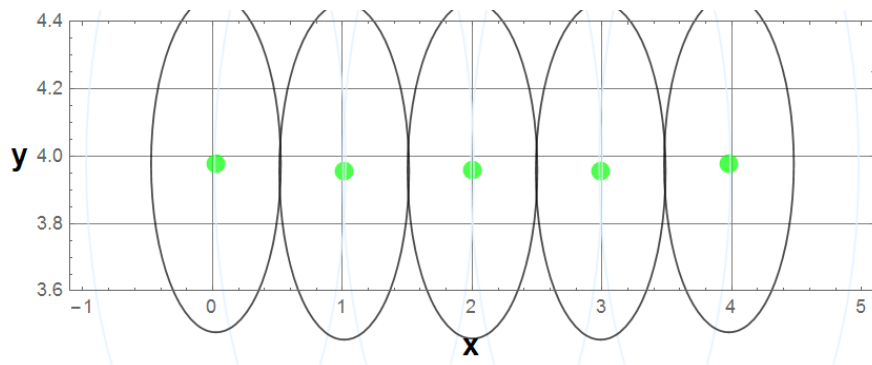


Abbildung 4.47: Oberste Reihe des symmetrischen Vielteilchensystem. Durch die Verzerrung der y-Achse ist die Schrumpfung deutlich zu erkennen.

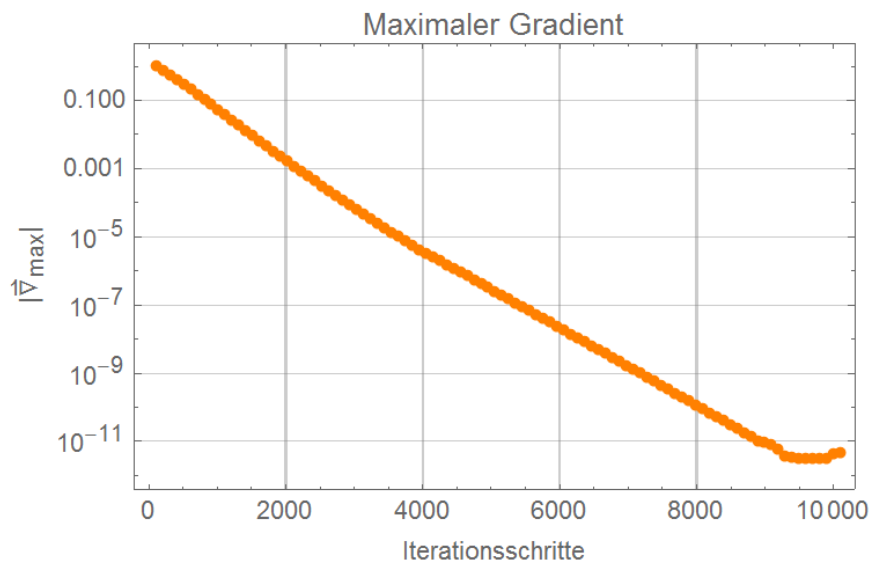


Abbildung 4.48: Verlauf des maximalen Gradienten über der Anzahl der Iterationsschritte mit logarithmischer y-Achse.

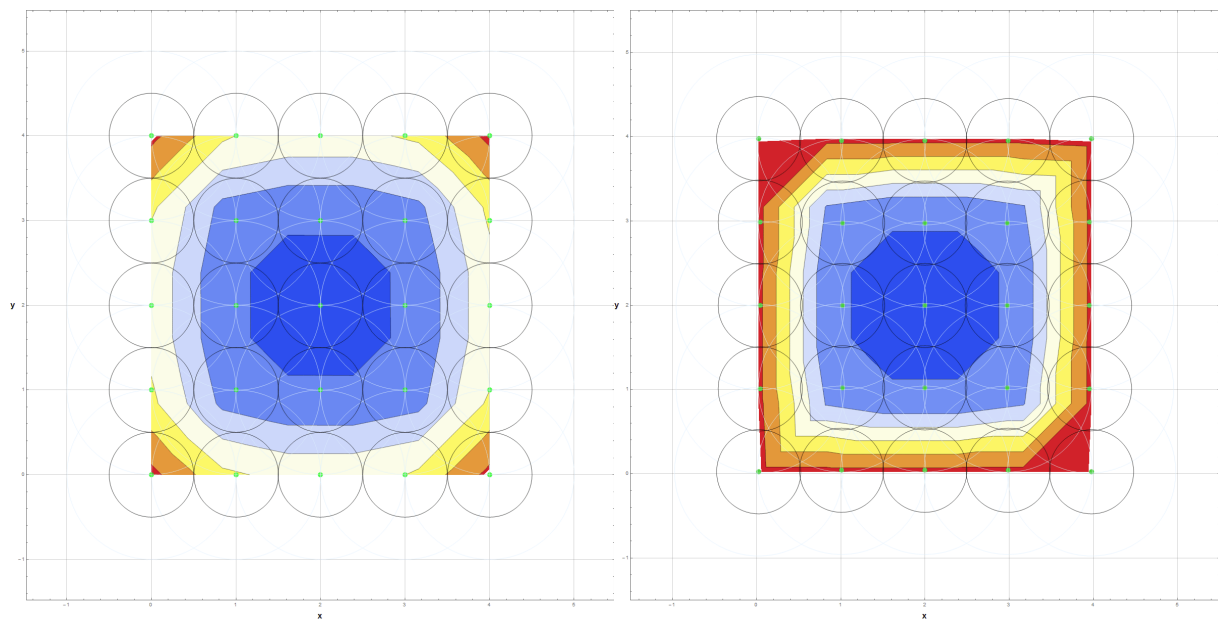


Abbildung 4.49: In dem dargestellten Konturdiagramm ist das Potenzialniveau der Teilchen zu sehen. Die linke Graphik zeigt den Anfangszustand, die rechte den Endzustand. Es ist sehr gut zu erkennen, dass sich die Teilchen ringförmig auf ein gleichmäßiges Potenzialniveau anordnen.

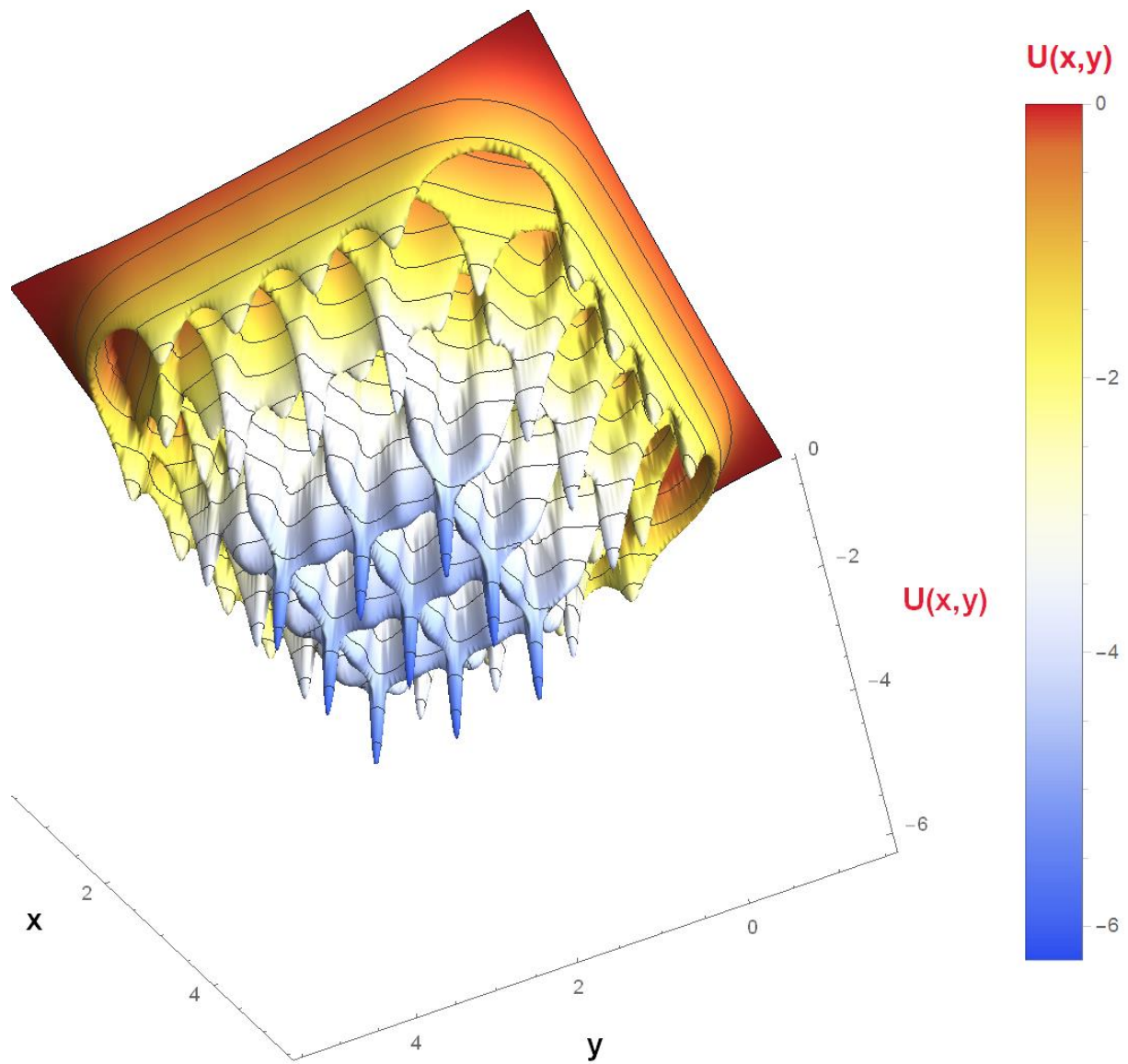


Abbildung 4.50: Von unten ist in dem 3D-Potenzialdiagramm der Verlauf des Potenzials zwischen den Teilchen als dünne Stege zu erkennen.

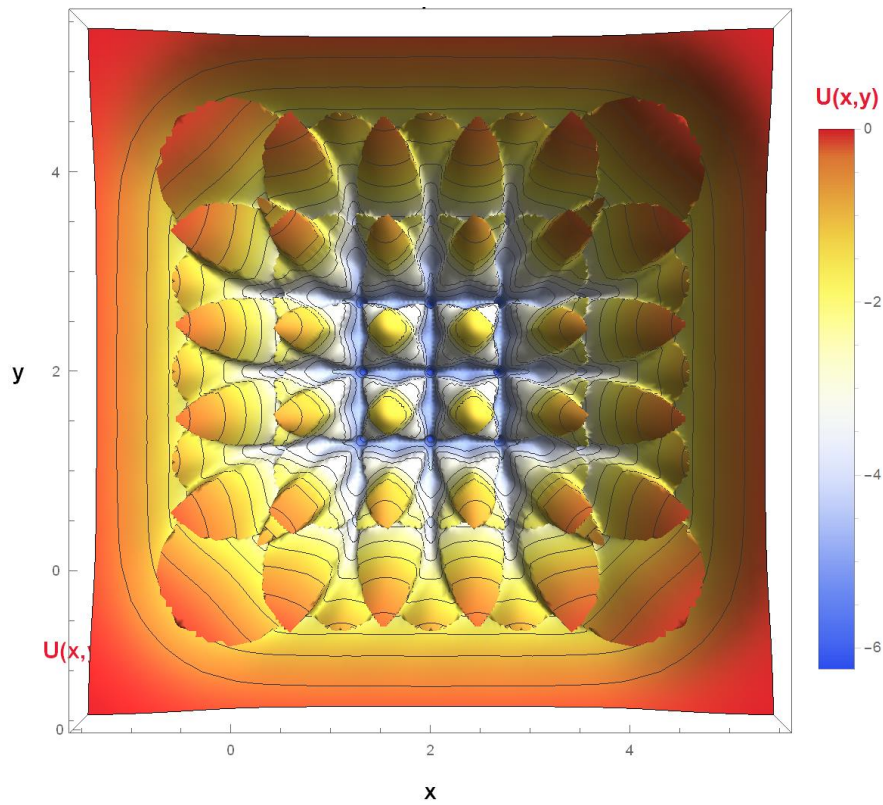


Abbildung 4.51: 3D-Potenzialdiagramm von oben dargestellt. Die Teilchen befinden sich an den Orten der Potentialminima (dunkel blau).

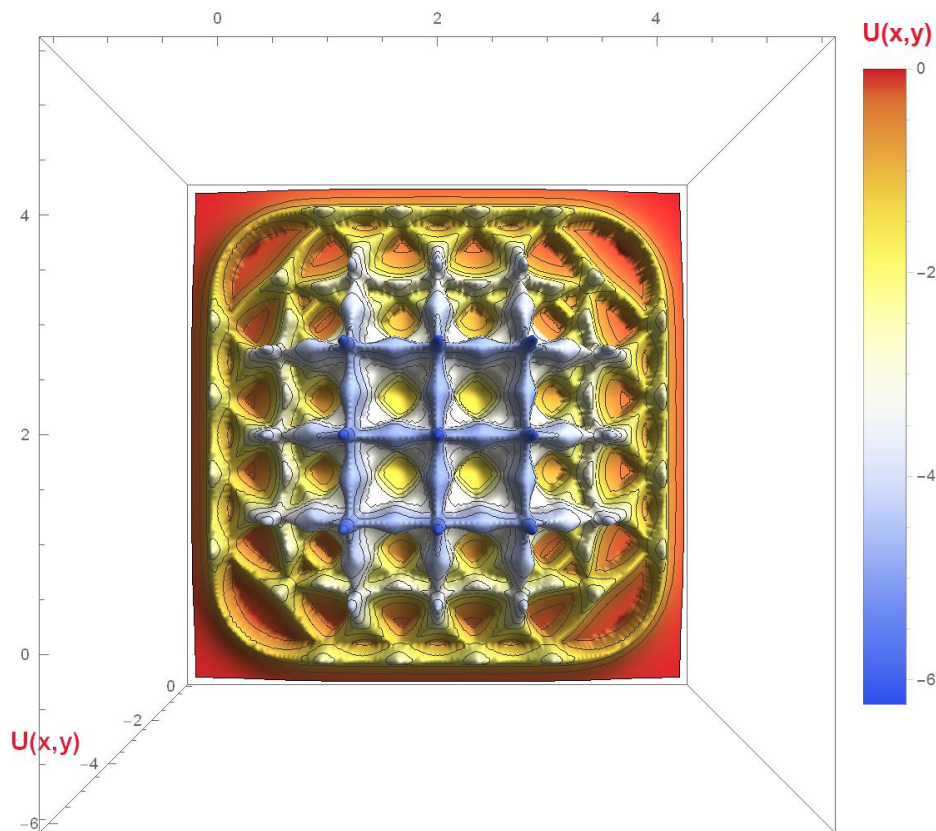


Abbildung 4.52: 3D-Potenzialdiagramm von unten gesehen.

Wird dieses System durch eine Verschiebung eines Teilchens aus dem Gleichgewicht gebracht, kollabiert das System. Es stellen sich stabile Gleichgewichte ein. Das durch eine Verschiebung des unteren linken Teilchens gestörte System zeigt Abbildung 4.53 links direkt nach der gezeigten Störung. Der stabile Endzustand ist in Abbildung 4.53 rechts zu abgebildet. In Abbildung 4.55 ist der Endzustand im 3D-Potenzialdiagramm dargestellt. Durch die Störung hat sich eine stabile hexagonale Topologie gebildet.

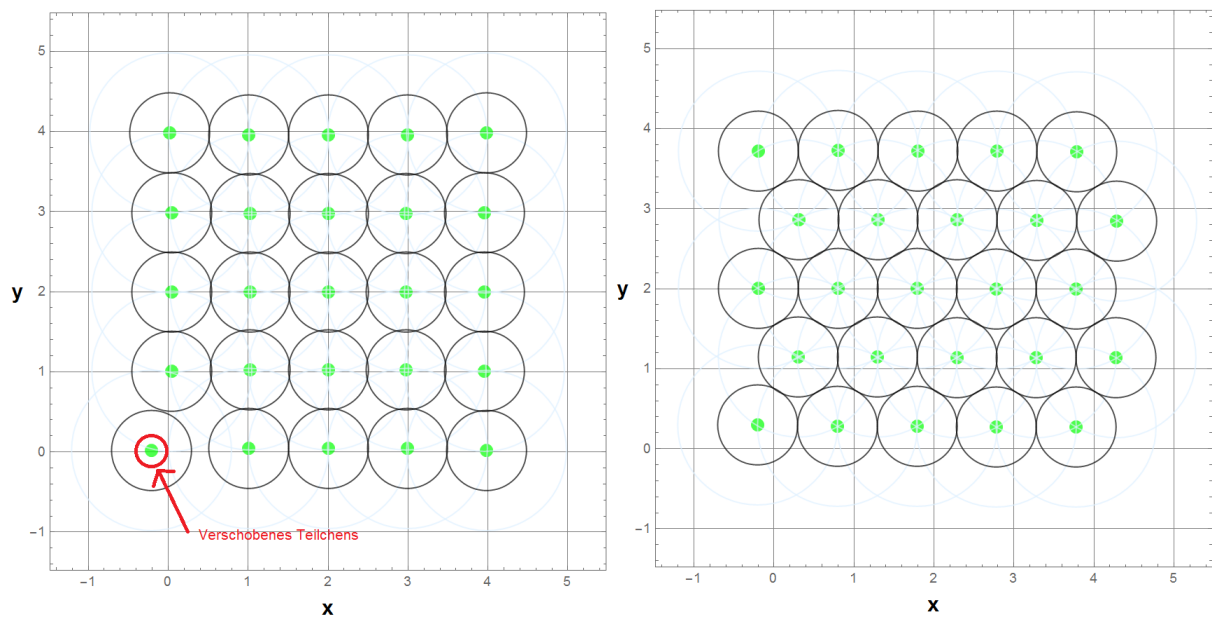


Abbildung 4.53: Ein labiles System (links) wird durch die Verschiebung eines Teilchens gestört. Den stabilen Endzustand des Systems zeigt die linke Graphik.

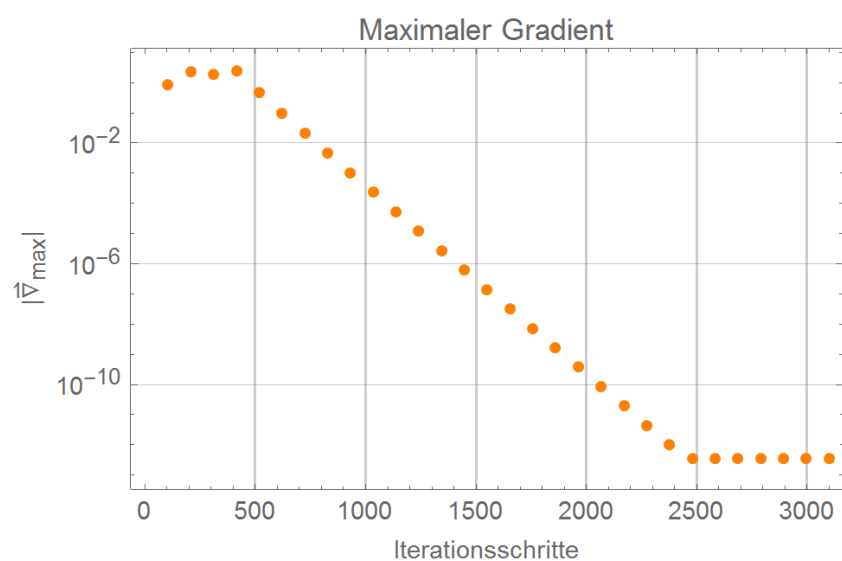


Abbildung 4.54: Verlauf des maximalen Gradient über der Anzahl der Iterationsschritte mit logarithmischer y-Achse.

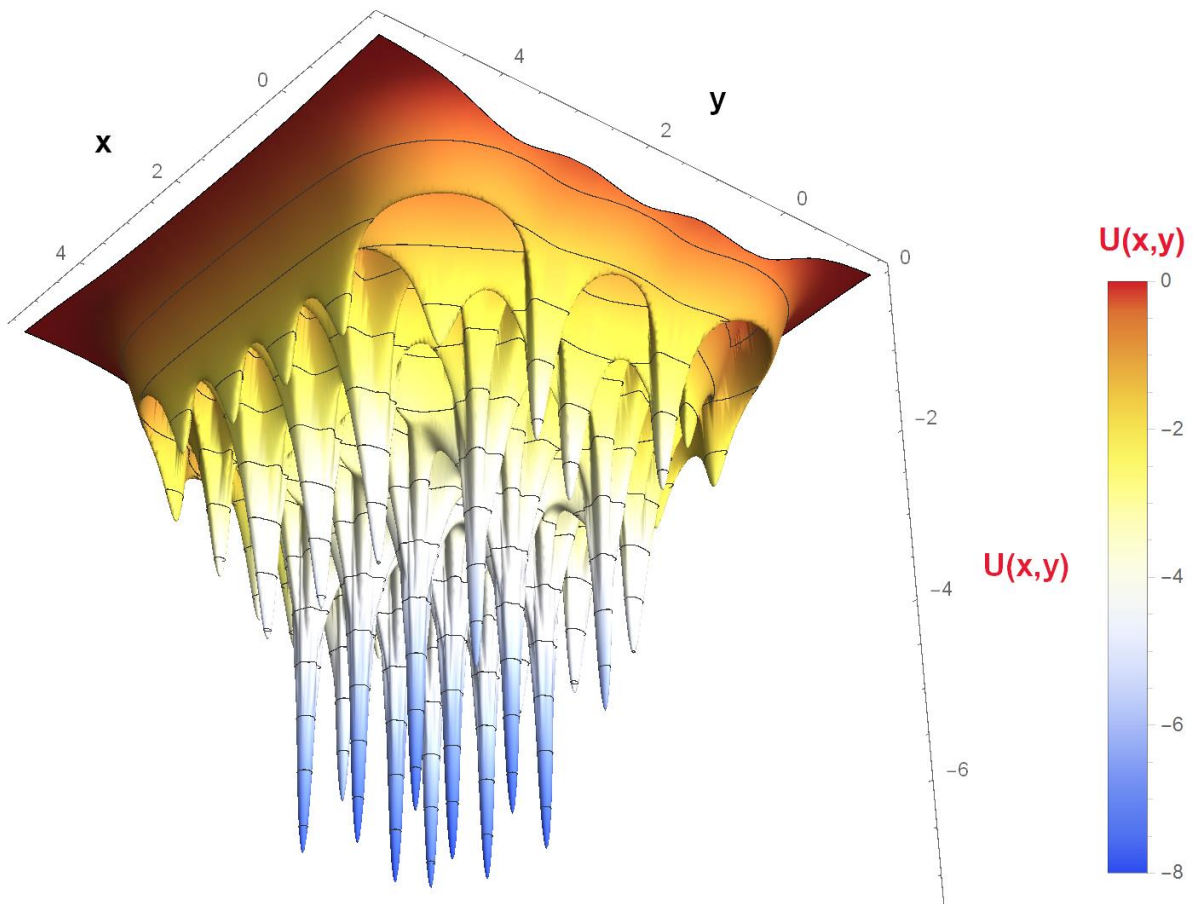


Abbildung 4.55: 3D-Potenzialdiagramm des stabilen Endzustands.

4.2.7 Selbstorganisiertes Schrumpfungsverhalten von Vielteilchensystemen

Die Simulation zeigt wie ein großes Teilchensystem bei der Fixierung zweier Randbereiche reagiert. Hierfür werden 81 Teilchen in einem versetzten Netz mit einem Abstand von $r_0 \cdot 1.03$ angeordnet. Die linke und die rechte vertikale Reihe sind fixiert. Der Schrittweitenfaktor beträgt $\mu = 0,001$. Der Anfangs- und der Endzustand sind in den Abbildung 4.56 und Abbildung 4.57 dargestellt. Bei der Iteration bewegen sich die Teilchen zum kleinst möglichen Potenzial. Das globale Potenzialminimum des Systems (ohne eine Fixierung), befindet sich etwas unterhalb der Bindungslänge r_0 (siehe Kapitel 4.2.1). Da sich die fixierten Teilchen nicht bewegen können, zieht sich das System dafür stärker in y -Richtung zusammen. Solche Verzerrungen sind auch bei Sintervorgängen zu beobachten **[Melcher, 2006]**.

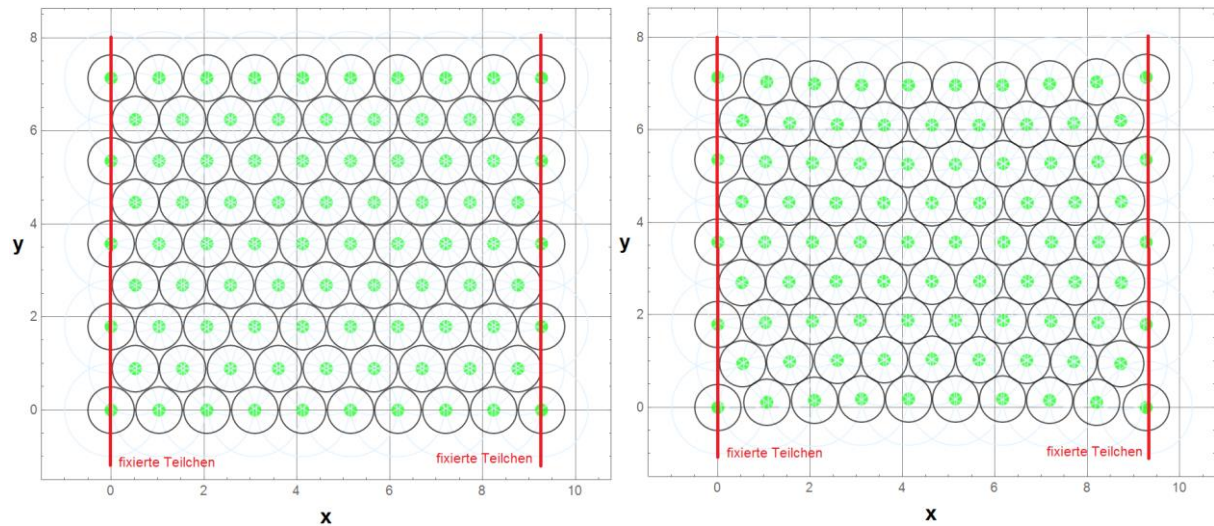


Abbildung 4.56: Startzustand links und Endzustand rechts eines symmetrischen Vielteilchensystems. Die rechte und linke senkrechte Teilchenreihe sind in x - und y -Richtung fixiert.

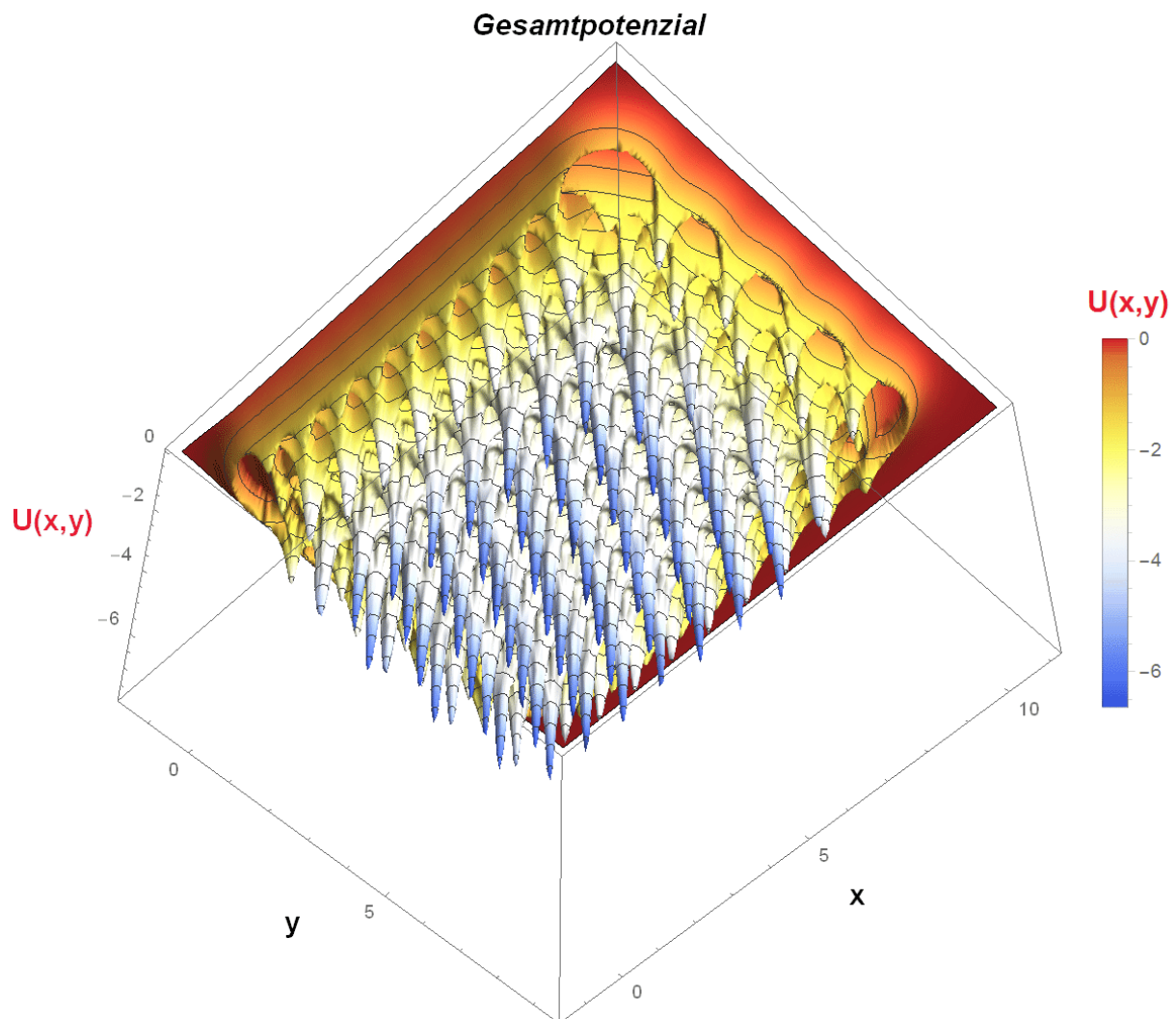
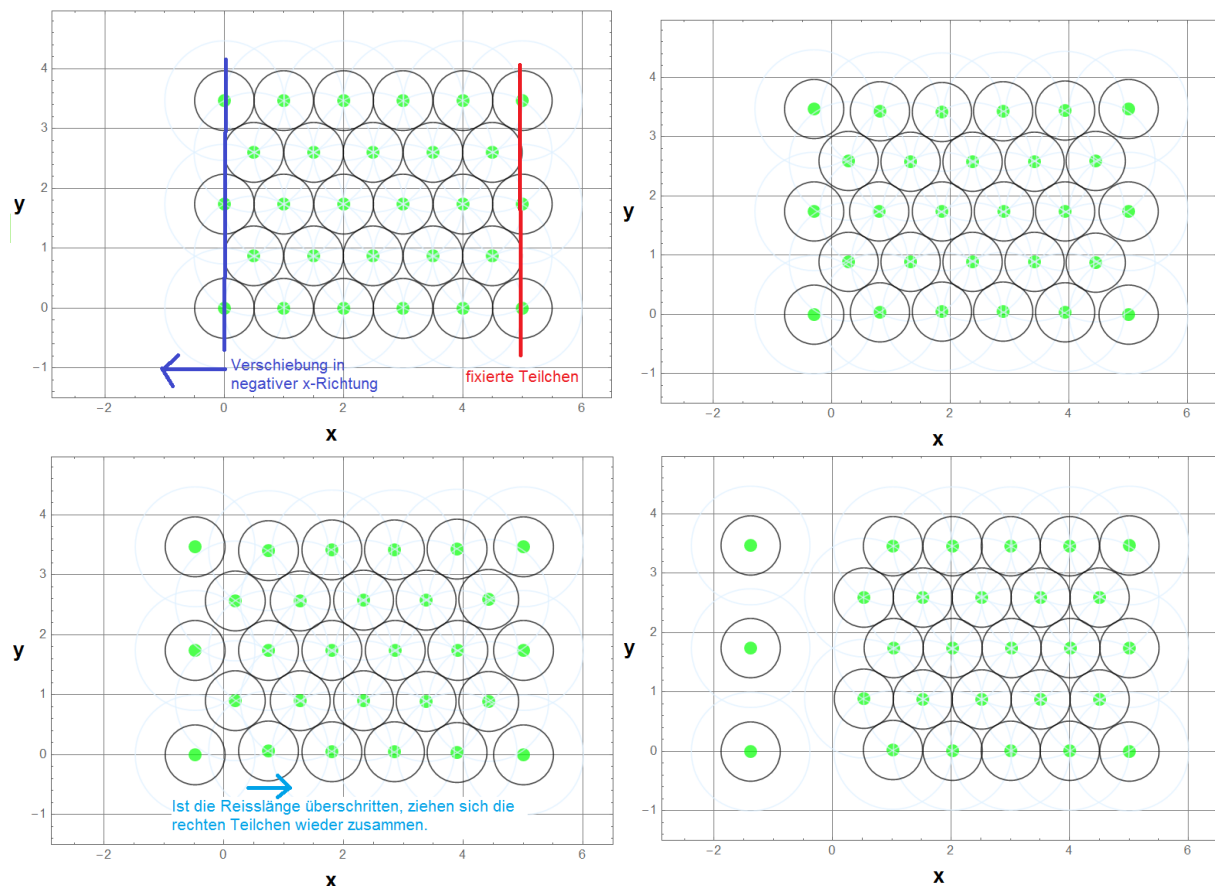


Abbildung 4.57: 3D-Potenzialdiagramm des Endzustands des symmetrischen Vielteilchensystems.

4.2.8 Selbstorganisiertes Verhalten von Vielteilchensystemen bei äußerer Belastung

In zwei weiteren Simulationen soll das Verhalten der Teilchen gezeigt werden, wenn eine Seite fixiert ist und an der anderen gezogen oder gedrückt wird. Dazu wird von einem symmetrischen Anfangszustand mit dem Bindungsabstand r_0 ausgegangen. Die rechte Reihe der Teilchen ist fixiert, während die linke Reihe nach jedem Iterationsdurchlauf mit einer Schrittweite von $\Delta x = \mu/5$ in die negative x -Richtung verschoben wird. Eine Bildreihe ausgewählter Iterationsschritte ist in den Abbildungen 4.58 dargestellt. Sobald die Teilchen der rechten Reihe verschoben werden, folgen die anderen. Es stellt sich wie bei dem vorangegangenen Beispiel eine leichte bogenförmige Randkontur ein. Überschreitet das System die Reißlänge r_w , ist eine weitere elastische Verformung nicht mehr möglich. Es bilden sich Versetzungen bis das System vollständig auseinander bricht (Abbildungen 4.58 unten rechts). Das 3D-Potenzialdiagramm des Endzustandes zeigt Abbildung 4.59.



Abbildungen 4.58: Iterationsschritte eines Systems mit fixierten Teilchen und Teilchen die verschoben werden. Die rechte Reihe der Teilchen ist in x und y -Richtung fixiert. Die linke Reihe wird schrittweise nach links verschoben. Alle anderen Teilchen können sich frei in x - und y -Richtung verschieben.

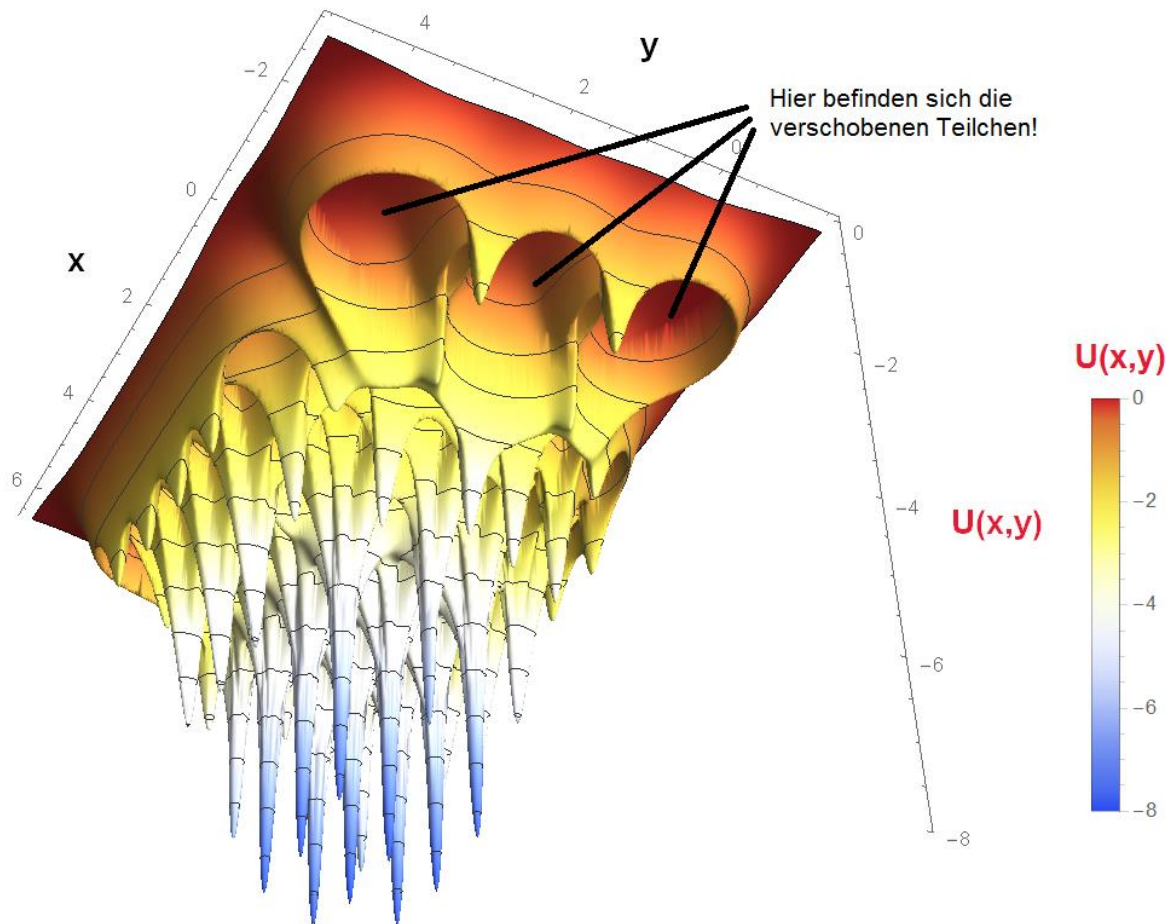


Abbildung 4.59: 3D-Potentialdiagramm des Endzustandes.

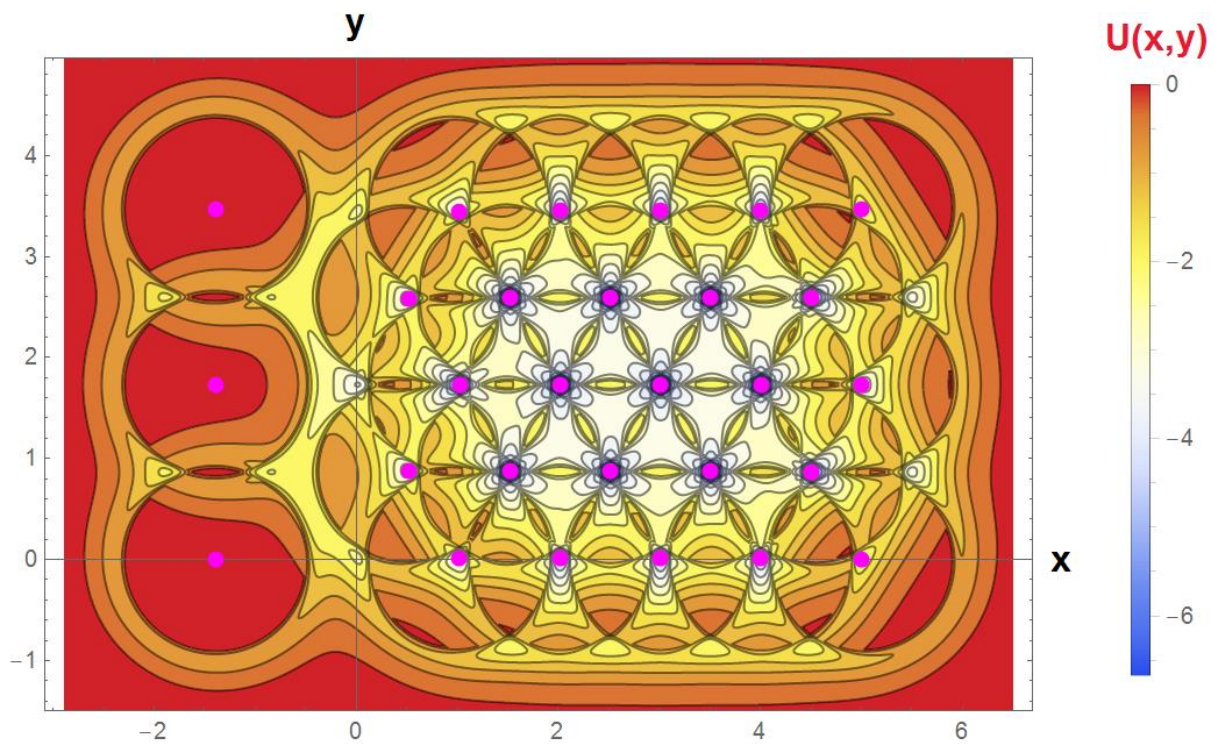


Abbildung 4.60: 2D-Konturdiagramm des Potentials im Endzustand.

Bei gleichen Startvoraussetzungen wird das System nun zusammengedrückt. Einige Schritte des Iterationsverlaufes sind in der Abbildung 4.61 gezeigt. In den oberen beiden Bildern sind der Anfangszustand und der Zustand maximaler zulässiger Kraft dargestellt. Wird das System weiter zusammengedrückt kollabiert es. Aus der mittleren Teilchenreihe verlassen zwei Teilchen den Darstellungsbereich (untere Graphik Abbildung 4.61).

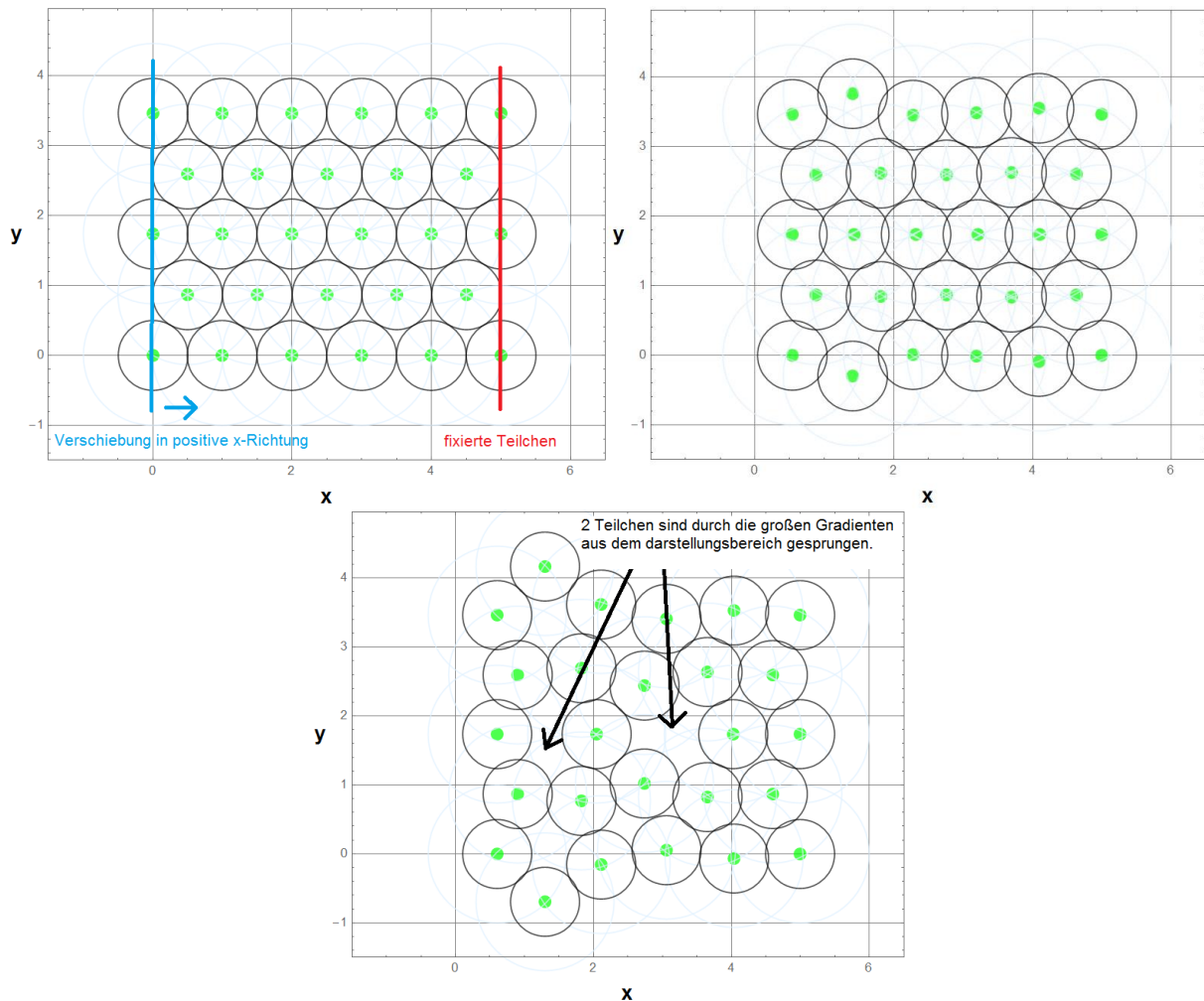


Abbildung 4.61: Iterationsschritte eines Systems mit fixierten Teilchen und Teilchen, die verschoben werden. Die rechte Reihe der Teilchen ist in x - und y -Richtung fixiert. Die linke Reihe wird schrittweise nach rechts verschoben. Alle anderen Teilchen können sich frei in x - und y -Richtung verschieben. In den oberen beiden Bildern sind der Anfangszustand und der Zustand maximaler zulässiger Kraft dargestellt. Die Untere Graphik zeigt den Zustand nach dem das System kollabiert ist.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Was vorstellbar ist, ist auch machbar.

(Albert Einstein)

Die potenzialbasierte Modellierung selbstorganisierter Systeme stellt höchste Ansprüche an die Simulationsalgorithmen. Die im Rahmen dieser Arbeit generierten Simulationen zeigen, dass die Mechanismen von selbstorganisierten Prozessen mit Hilfe vereinfachter physikalischer Modelle dargestellt werden können. Mit Hilfe von harmonischen Potenzialen und Lennard-Jones-Potenzialen lassen sich Prozessabläufe von Vielteilchensystemen sehr gut verstehen. Die durchgeführten Untersuchungen folgende Zusammenhänge auf:

- *Die Selbstorganisation ist die spontane Entstehung stabiler und regelmäßiger Strukturen in dissipativen Systemen.*
- *Außerdem sind die Offenheit und die Nichtlinearität des Systems eine Grundvoraussetzung, damit sich die freie Enthalpie minimieren kann.*
- *Selbstorganisierte Strukturbildungen bilden bevorzugt hexagonale Topologien aus.*
- *Die Endzustände selbstorganisierter Prozesse sind energetisch günstige Topologien.*
- *Abhängig von den Start- und Randbedingungen des Systems erreichen die entstandenen Strukturen nicht immer ein globales energetisches Minimum.*
- *Eine induzierte Störung überführt ein labiles System per Selbstorganisation in einen stabilen Endzustand.*
- *Durch eine gezielte Manipulation der Systempotenziale und durch geeignete Wahl der Start- und Randbedingungen lassen sich sowohl gewünschte als auch überraschende End-Topologien einstellen.*

Eine quantitative Validierung der Simulationen steht aus. Die Parameter des Lennard-Jones-Potenzial müssen dafür an ein reales Materialsystem angepasst werden. Die Möglichkeiten zur Beschreibung von Systemen mit dem Lennard-Jones-Potenzial sind dabei noch längst nicht ausgeschöpft. Die Vielfalt hinsichtlich der Prozessabläufe und der Endzustände ist bei selbstorganisierten Prozessen nahezu unerschöpflich. Die in der vorliegenden Arbeit entwickelten Algorithmen sind ein erster Schritt zu komplexeren Simulationen, die weit mehr als die dargestellten Mechanismen berücksichtigen können.

Folgende Verbesserungen und Erweiterungen sind im „Einstein’schen“ Sinne vorstellbar:

- *Ausnutzung von Symmetrien der Systeme.*
- *Parallelisierung der Berechnungen.*
- *Integration der dritten Dimension (z-Richtung).*
- *Berücksichtigung kinetischer und dissipativer Energie*
- *Erweiterung der Potenziale.*

Die vorgeschlagenen Erweiterungen werden sicherlich zu aussagekräftigen Modellrechnungen führen. Von besonderer Bedeutung ist die Erweiterung der Potenziale.

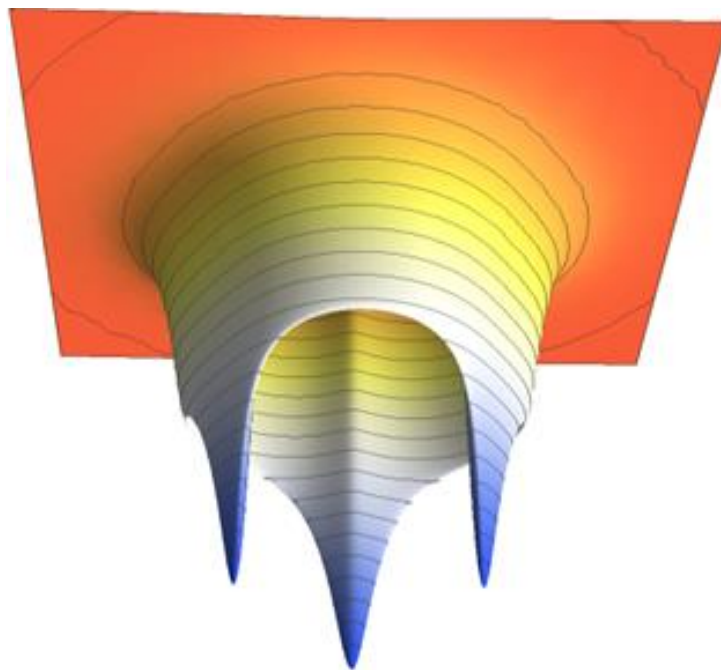


Abbildung 5.1: Beispiel eines Potentials, das räumlich drei Minima aufweist. Dies könnte als vereinfachtes Modell für orbitale Bindungsmechanismen zwischen Atomen verwendet werden.

Ähnlich wie die Orbitale von Atomen besitzt das Teilchen dann kein radialsymmetrisches Potenzial, wie das Lennard-Jones-Potenzial, sondern ein richtungsabhängiges Potenzial. Ein Beispiel dafür, wie ein solches Potenzial aussehen könnte, zeigt die Abbildung 5.1. Das Teilchenpotenzial hat drei symmetrisch ausgerichtete Potenzialminima. Es ist dadurch vorstellbar, die richtungsabhängigen Eigenschaften bestimmter atomarer Bindungen einzubeziehen. Die Teilchenpotenziale könnten durch die räumliche Verteilung der Orbitale oder durch die Lösungen der Schrödingergleichung bestimmt werden. Es ist dabei natürlich wünschenswert, eine analytische Lösung zu finden, so dass Potenziale sinnvoll in die Simulation integriert werden kann. Sehr aufwändige Modelle aus der Molekülorbital-Theorie oder der Dichtefunktionaltheorie liefern bereits Möglichkeiten, Quanteneffekte zu berücksichtigen. Allerdings ist der Rechenaufwand extrem hoch.

Die Modellierung von Selbstorganisationsprozessen mit Hilfe von Potenzialen (wie in der vorliegenden Arbeit) ist eine sehr erfolgsversprechende Methode, um Vielteilchensysteme zu modellieren. Sie besticht durch außerordentlich einfache Algorithmen und zeigt dennoch das ‚Potenzial‘, weit mehr als die aufgezeigten System-Eigenschaften beschreiben zu können.

6 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1.1: 3D-Potenzial einer hexagonalen Einheitszelle (seitliche Betrachtung). Die Erläuterung erfolgt in der vorliegenden Arbeit.	16
Abbildung 2.1: Harmonisches Schwingungssystem eines Feder-Masse-Systems.	20
Abbildung 2.2: Energetischer Zusammenhang bei einer Feder in Abhängigkeit von der Auslenkung x . 1.: Die Feder ist entspannt. 2.: Die Feder wird zusammen mit der Masse ausgelenkt. Masse und Feder bilden ein harmonisches reibungsfreies Schwingungssystem.	21
Abbildung 2.3: Auslenkung eines idealen Feder-Masse-Systems: Links ist der Bewegungsverlauf der Masse über der Zeit aufgetragen. Das rechte Diagramm zeigt den Kräfteverlauf zwischen der Feder und der Masse in Form der Federkraft F_k und der Trägheitskraft der Masse F_m	23
Abbildung 2.4: Energie- und Leistungsverlauf bei einem idealen Feder-Masse-System. Das linke Diagramm zeigt den Verlauf der Energien des Systems. Im rechten Diagramm ist die Leistung über der Zeit aufgetragen.	23
Abbildung 2.5: Aufbau des mechanischen Feder-Masse-Dämpfersystem.	25
Abbildung 2.6: Gedämpftes Schwingungssystem. Links ist der zeitliche Bewegungsverlauf und rechts der Kraftverlauf über der Zeit dargestellt.	25
Abbildung 2.7: Gedämpftes Schwingungssystem: Oben ist die Energie, unten die Leistung über der Zeit aufgetragen.	27
Abbildung 2.8: Potenzielle Energie einer Feder in Abhängigkeit von der Auslenkung x . Der Ort, an dem die potenzielle Energie am kleinsten ist, entspricht dem stationären Endzustand eines Systems, solange kein Kriechfall durch zu große Dämpfungswerte vorliegt.	28
Abbildung 2.9: Unterschied zwischen der potenziellen Energie $E_{pot}(x, k)$ und dem Potenzial $U(x)$. Das Potenzial $U(x)$ beschreibt qualitativ den Verlauf der Energie und gibt somit nur die „Form“ des Verlaufes vor. Die potenzielle Energie als Funktion des Weges hingegen beschreibt die potenzielle Energie, die an diesem Ort tatsächlich wirken würde. Der feine Unterschied ist der Proportionalitätsfaktor k der Feder.	30
Abbildung 2.10: Links: Beim Austrocknen von Schlammputzen entstehen „selbstorganisierte“ wabenförmige Rissstrukturen. Entnommen aus: [Bild1, 2015]. Rechts: Der Bergkristall entsteht durch einen selbstorganisierten potenzialbasierten Prozess, entnommen [Fuchs, 2015].	31
Abbildung 2.11: Selbstorganisierter Prozess: links: Bei der Rayleigh-Bénard-Konvektion entstehen wabenförmige Strukturen entnommen aus: [Jung, 1998]. Rechts ist der Strömungsvorgang der Rayleigh-Bénard-Konvektion schematisch dargestellt, entnommen aus: [Tullius, 2015].	32
Abbildung 2.12: Potenzialverlauf eines Teilchen. An dem Potenzial sind zwei mögliche stationäre Endzustände zu sehen. Diese befinden sich in den „Vertiefungen“ der Potenzialkurve. Befindet sich das System in einem höhergelegenen Zustand, ist das System metastabil. Erreicht das System den unteren Zustand, wird der Zustand als stabil bezeichnet, entnommen: [Melcher, 2004].	33

Abbildung 2.13: Potenzialverlauf eines Teilchen. An dem Potenzial sind zwei mögliche stationäre Zustände zu sehen. Durch Manipulation des ursprünglichen Potenzials (rote Kurve) ergibt sich der rotgestrichelte Potenzialverlauf, entnommen: [Melcher, 2004].	34
Abbildung 2.14: Coulomb'sches Gesetz am Beispiel zweier Punktladungen ($Q_1 = -10 - 6 \text{ C}$, $Q_2 = 3 \cdot 10 - 6 \text{ C}$). Zwei ungleichnamige Ladungen ziehen sich gegenseitig an.	38
Abbildung 2.15: Coulomb'sches Gesetz am Beispiel zweier Punktladungen ($Q_1 = -10 - 6 \text{ C}$, $Q_2 = 3 \cdot 10 - 6 \text{ C}$), wobei sich Q_1 im Ursprung des Koordinatensystems befindet, und Q_2 sich auf der Abzisse bewegt. Dargestellt ist die Kraft, welche auf die Ladung Q_2 abhängig von Abstand r_{12} wirkt.	39
Abbildung 2.16: Coulomb'sches Gesetz am Beispiel zweier Punktladungen in der xy -Ebene ($Q_1 = -10 - 6 \text{ C}$, $Q_2 = 3 \cdot 10 - 6 \text{ C}$), wobei sich Q_1 im Ursprung des Koordinatensystems befindet. In z -Richtung ist die Kraft aufgetragen, welche auf die Ladung Q_2 abhängig vom Abstand r_{12} wirkt.	40
Abbildung 2.17: Gravitationskraft am Beispiel der Erde mit der Annahme einer homogen Massenverteilung und einer Referenzmasse $m_2 = 1 \text{ kg}$.	42
Abbildung 2.18: Feldlinien eines positiv geladenen Teilchens (links) und eines negativ geladenen Teilchens (rechts).	44
Abbildung 2.19: Feldlinien von: zwei positiv geladenen Teilchen (links), eines positiv- und eines negativ geladenen Teilchens (rechts)	44
Abbildung 2.20: Elektrisches Potenzial: positiv geladenen Teilchens (links), negativ geladenen Teilchens (rechts).	46
Abbildung 2.21: Elektrisches Potenzial und elektrische Feldlinien: links eines positiv geladenen Teilchens, rechts von zwei ungleichnamig, gleich großen geladenen Teilchen.	46
Abbildung 2.22: Elektrisches Potenzial als Höhenmodell zweier ungleichnamiger, gleich großer Ladungen.	47
Abbildung 2.23: Elektrisches Potenzial zweier ungleichnamiger, gleich großer Ladungen. Die schalen symbolisieren Flächen gleichen Potenzials.	48
Abbildung 2.24: Gravitationspotenzial der Erde. Das Potenzial besitzt im Erdmittelpunkt bei $r = 0$ ein Potenzialminimum. Das Potenzial nimmt mit dem Abstand r zum Mittelpunkt zu. Ab $r = R$ wird die Zunahme des Potenzials auf Grund der nicht mehr vorhandenen Masse kleiner.	51
Abbildung 2.25: Federkennlinie einer linearen Schraubenfeder. l_0 beschreibt die Länge der entspannten Länge der Feder. Das rechte Diagramm zeigt den Zusammenhang zwischen der Kraft F und der Auslenkung x der Feder aus ihrer Ruhelage. An dem Punkt P_0 ist die Feder fixiert.	52
Abbildung 2.26: Harmonisches Potenzial eines Federsystems mit einer entspannten „Federlänge“ $l_1 = 0$.	55
Abbildung 2.27: Mechanischer Aufbau eines Feder-Masse-Systems mit einer entspannten Federlänge $l_0 = 0$.	58
Abbildung 2.28: Bewegungsverlauf über der Zeit des Feder-Masse-Systems in x -Richtung.	60
Abbildung 2.29: Dreidimensionaler Bewegungsverlauf des Feder-Masse-Systems im Potenzialfeld, hier in der "der Form" der potenziellen Energie.	60
Abbildung 2.30: Dreidimensionaler Bewegungsverlauf des Feder-Masse-Systems mit einer zusätzlichen Anfangsgeschwindigkeit in y -Richtung.	61

Abbildung 2.31: Lennard-Jones-Potenzial mit abstoßenden und anziehenden Term. Es zeigt den ortsabhängigen Verlauf der Energie, welche zwischen zwei Teilchen bezüglich ihres Abstandes r herrscht.	64
Abbildung 2.32: Lennard-Jones-Potenzial mit dem Gradienten und negativen Gradienten des Potenzials. Es zeigt den Verlauf der Energie, welche zwischen zwei Teilchen bezüglich ihres Abstandes r herrscht. Die Gradienten geben die lageabhängige Kraft an.....	65
Abbildung 2.33: Teilchen die durch das Lennard-Jones-Potenzial wechselwirken, können nur diskrete Schwingungszustände einnehmen.....	68
Abbildung 2.34: Zusammenhang der thermischen Ausdehnung eines Körpers, der durch die Schwingung der Teilchen um ihr potenzielles Minimum im Lennard-Jones-Potenzials, erklärt werden kann.	69
Abbildung 2.35: 3D-Potenzialdarstellung eines in der xy -Ebene wirkenden des Lennard-Jones-Potenzial.....	69
Abbildung 3.1: Simulation mit zwei Teilchen und dem Lennard-Jones-Potenzial. Das blaue Teilchen ist fixiert, das grüne variabel. Die Abbildung zeigt den Anfangszustand des Systems, bei dem die Teilchen sich noch nicht im Potenzialminimum befinden.....	75
Abbildung 3.2: Simulation mit zwei Teilchen und dem Lennard-Jones-Potenzial. Das blaue Teilchen ist fixiert, das grüne variabel. Dargestellt sind drei Zustände des Iterationsablaufes zu den Zeitpunkten $0 < t_1 < t_2 < t_3$. Die obere Abbildung zeigt den Anfangszustand. Die Teilchen sind och weit vom Potenzialminimum entfernt. Die mittlere Graphik zeigt den Zwischenstand bei t_2 . Das blaue Teilchen hat sich schon in Richtung Potenzialminimum bewegt. Ganz unten sind beide Teilchen im Potenzialminimum des jeweils anderen Teilchens.....	76
Abbildung 3.3: Programmausschnitt aus dem Mathematica Programm „Potenzialbasierte Modellierung selbstorganisierter Systeme“. Dargestellt ist die Schleife für die Berechnung der Verschiebungen. Die Anzahl der Schleifendurchläufe entspricht der Anzahl der Teilchen.	78
Abbildung 3.4: Erläuterung der Berechnung des negativen Gradienten eines Teilchens mit Mathematica Programm „Potenzialbasierte Modellierung selbstorganisierter Systeme“	78
Abbildung 3.5: Programmausschnitt der Schleife für die Berechnung der Verschiebungen. Die Anzahl der inneren Schleifendurchläufe entspricht der Anzahl der Teilchen. Die äußere Schleife steuert die Anzahl der Iterationsschritte.	79
Abbildung 3.6: Einfache Darstellung der Teilchenpositionen in einem ebenen xy -Diagramm. Der Kreis $r_0/2$ entspricht dem Raum, den ein Teilchen einnimmt. Der Kreis r_0 ist der Abstand, bei dem das Teilchen sein Potenzialminimum besitzt.	80
Abbildung 3.7: Verschiedene Darstellungsformen im Ortsdiagramm. Links sind die Orte der Teilchen in der xy -Ebene als grüne Punkte dargestellt. In der Mitte sind die Teilchen durch ein Delaunay-Netz miteinander verbunden. Die rechten Diagrammen zeigen die Teilchen mit einem Voronoi-Netz. Die oberen Diagramme zeigen den Anfangszustand des Systems, die untere Reihe den Endzustand.	81
Abbildung 3.8: Gesamtpotenzial eines Vielteilchensystems aus zwei verschiedenen Perspektiven. Die oberen Diagramme zeigen den Anfangszustand des Systems, die untere Reihe den Endzustand.....	83

Abbildung 3.9: 2D-Gesamtpotenzial als Konturdiagramm eines Vielteilchensystems: oben der Anfangszustand und unten der Endzustand.	84
Abbildung 3.10: 3D Energieniveau der Teilchen eines Vielteilchensystems links des Anfangszustandes und rechts des Endzustandes.....	85
Abbildung 4.1: Federsystem mit der entspannten Feder $\mathbf{l}_0 > \mathbf{0}$ und einer Masse.....	88
Abbildung 4.2: Links ist das 3D-Energiediagramm eines Feder-Masse-System mit $\mathbf{l}_0 = \mathbf{0}$ abgebildet. Rechts ist das 2D-Energiediagramm als Kontur zusammen mit den Kraftfeldlinien dargestellt.....	89
Abbildung 4.3: Bewegungsverlauf der Masse im 3D-Energiediagramm. Oben links ist der Bewegungsverlauf bezüglich der x -Achse dargestellt.....	90
Abbildung 4.4: Bei einer Anfangsgeschwindigkeit der Masse in y -Richtung und einer Anfangsauslenkung, bewegt sich die Masse mit Pendelbewegungen um den Lagerpunkt der Feder. Zu sehen ist der Bewegungsverlauf der Masse im 3D-Energiediagramm. Die Graphik Oben rechts zeigt die Bewegung in der xy -Ebene.....	91
Abbildung 4.5: Mechanischer Aufbau eines Feder- Masse-Systems mit 2 Federn.	92
Abbildung 4.6: 3D-Energiediagramm eines Feder-Masse-Systems mit zwei Schraubenfedern. Es entstehen durch die Konfiguration zwei Energieminima, in denen das System einen stabilen Zustand einnehmen kann.	93
Abbildung 4.7: 2D-Energiediagramm eines Feder-Masse-Systems mit zwei Schraubenfedern. Es entstehen durch die Konfiguration zwei Energieminima, in denen das System einen stabilen Zustand einnimmt. 93	
Abbildung 4.8: Links: 2D-Energiediagramm mit dem Bewegungsverlauf der Masse; rechts: 3D-Energiediagramm zusammen mit dem Bewegungsverlauf der Masse.	94
Abbildung 4.9: Links: 2D-Energiediagramm mit dem Kraftfeld und dem Bewegungsverlauf der Masse. Rechts: 3D-Energiediagramm zusammen mit dem Bewegungsverlauf der Masse.	95
Abbildung 4.10: Links: Energiediagramm in der Konturdarstellung mit dem Kraftfeld und den Bewegungsverlauf der Masse. Rechts: 3D-Energiediagramm zusammen mit dem Bewegungsverlauf der Masse. ..	95
Abbildung 4.11: Mechanische Aufbau eines Feder Masse Systems aus drei Schraubenfedern, die symmetrisch um den Ursprung angeordnet sind.	96
Abbildung 4.12: Die linke Graphik zeigt die Konturdarstellung der potenziellen Energie mit dem Kraftfeld und dem Bewegungsverlauf der Masse. Das rechte Diagramm zeigt das 3D-Energiediagramm zusammen mit dem Bewegungsverlauf der Masse.	97
Abbildung 4.13: Abstände, die sich zwischen den Teilchen nach 1500 Iterationen einstellen. Durch die Überlagerung der Potenziale verkleinert sich der Teilchenabstand \mathbf{r}_0	100
Abbildung 4.14: Abstände, die sich zwischen den Teilchen nach 8800 Iterationen einstellen. Das System ist hier noch nicht konvergiert. Durch die Überlagerung der Potenziale verkleinert sich der Teilchenabstand \mathbf{r}_0	100
Abbildung 4.15: Abstände, die sich zwischen den Teilchen nach ca. 40.000 Iterationen einstellen. Durch die Überlagerung der Potenziale verkleinert sich der Teilchenabstand \mathbf{r}_0	100

Abbildung 4.16: 1D-Kette aus 5 Teilchen im Anfangszustand. Das Diagramm zeigt das 2D-Potenzialkontur. Die Teilchen befinden sich im dargestellten Zustand in ihren Potenzialminima.	102
Abbildung 4.17: 1D-Kette aus 5 Teilchen im Anfangszustand. Das Diagramm zeigt das 3D-Potenzial. Die Teilchen befinden sich im dargestellten Zustand in ihren Potenzialminima.	102
Abbildung 4.18: 1D-Kette aus 5 Teilchen kurz bevor die Kette reißt. Das Diagramm zeigt die 2D-Potenzialkontur. Es ist schon zu erkennen, dass die Teilchen sich nicht mehr ganz symmetrisch ausrichten (zweites Teilchen von rechts).	103
Abbildung 4.19: 1D-Kette aus 5 Teilchen kurz bevor die Kette reißt. Das Diagramm zeigt die 3D-Potenzial-Ansicht. Es ist schon zu erkennen, dass die Teilchen sich nicht mehr ganz symmetrisch ausrichten (zweites Teilchen von rechts).	103
Abbildung 4.20: 1D-Kette aus 5 Teilchen kurz nach dem die Reißlänge überschritten wurde. Die linken vier Teilchen ziehen sich wieder auf ihre ursprüngliche Länge zusammen.	104
Abbildung 4.21: 1D-Kette aus 5 Teilchen kurz nach dem die Reißlänge überschritten wurde. Die linken vier Teilchen ziehen sich wieder auf ihre ursprüngliche Länge zusammen.	104
Abbildung 4.22: Anfangszustand einer 2D-Teilchenkette aus 12 Teilchen. Oben ist das 2D Potenzialkonturdiagramm dargestellt, unten das 3D Potenzialdiagramm. Das zweite Teilchen von links ist um 0,1 in positiver y -Richtung verschoben. Die bewirkt eine Störung, die im weiteren Iterationsverlauf zu einer Faltung der Kette führt.	106
Abbildung 4.23: Zunächst zieht sich die Teilchenkette entlang der x-Achse zusammen, bis alle Teilchen in ihrem Potenzialminimum befinden. Dies ist an der Tiefe der Potenzialminimums besonders deutlich im 3D-Potenzialdiagramm zu sehen.	106
Abbildung 4.24: Durch die Störung eines Teilchens fängt die Kette sich von rechts an zu falten.	107
Abbildung 4.25: Im Endzustand hat sich die Kette vollständig gefaltet. Dies ist der energetisch günstigste Zustand, den die Teilchen, bezogen auf ihren Startzustand, einnehmen können.	107
Abbildung 4.26: Die Bilderreihe zeigt den Faltungsverlauf der Teilchenkette.	108
Abbildung 4.27: Kraftwirkung zwischen drei Teilchen in einem konstanten Potenzial. Durch die Wirkung der blau eingezeichneten Kräfte, kann die Kettenlinie nur näherungsweise mit der Simulation abgebildet werden.	109
Abbildung 4.28: Endzustand einer Teilchenkette in einem konstanten Potenzialfeld in y -Richtung. Das ganz linke Teilchen und das ganz rechte Teilchen sind in x und y -Richtung fixiert. Durch das konstante Potenzial werden die variablen Teilchen in negativer y -Richtung verschoben.	110
Abbildung 4.29: Die Teilchen nehmen nahezu die Form einer Kettenlinie an.	110
Abbildung 4.30: Die Bilderreihe zeigt den einige Schritte wie sich die Teilchenkette im Schwerfeld ausrichtet.	111
Abbildung 4.31: Anordnung der Teilchen im zweidimensionalen Raum. Bei diesen Systemen treten bei den Simulationen jeweils nur die dargestellten Topologien auf.	112

Abbildung 4.32: Anordnung von 6 Teilchen im zweidimensionalen Raum. Die linken beiden Muster wurden in den Simulationen am häufigsten beobachtet. Das rechte Muster hingegen tritt eher selten auf.	112
Abbildung 4.33: Anordnung von 7 Teilchen im zweidimensionalen Raum. Beobachtungen in den Simulation zeigen, dass sich das linke Muster am häufigsten bildet. Die drei rechten hingegen sind eher seltener.	113
Abbildung 4.34: In dem 3D-Potenzialdiagramm ist sehr gut zu sehen, dass das mittlere Teilchen am stärksten gebunden ist.	114
Abbildung 4.35: Aus einem ungeordneten Anfangszustand ordnen sich die Teilchen selbstorganisiert zu einer hexagonalen Einheitszelle an. Diese Musterbildung wurde bei den Simulationen und einem stochastischen Anfangszustand nur selten zu beobachten.	114
Abbildung 4.36: 3D-Potenzialdiagramm. Das linke Diagramm zeigt das Potenzial von oben, das rechte Diagramm von unten.	115
Abbildung 4.37: Endzustand als Konturdiagramm eines Systems mit sieben Teilchen.	115
Abbildung 4.38: Aus einem ungeordneten Anfangszustand (links) ordnen sich die Teilchen selbstorganisiert zu einer hexagonalen Gitterstruktur an.	116
Abbildung 4.39: Maximaler Gradient über der Iterationsnummer (die Anzahl der Iterationsschritte muss mit den Faktor 10 multipliziert werden!) mit logarithmischer y-Achse.	117
Abbildung 4.40: In dem 3D-Potenzialdiagramm ist sehr gut zu sehen, dass die mittleren Teilchen am stärksten gebunden sind.	117
Abbildung 4.41: 3D Potenzialdiagramm. Das obere Diagramm zeigt das Potenzial von oben, das untere Diagramm von unten.	118
Abbildung 4.42: Endzustand als Konturdiagramm eines Systems mit 19 Teilchen.	119
Abbildung 4.43: Aus einem ungeordneten Anfangszustand (oben links), ordnen sich die Teilchen selbstorganisiert zu einer verzerrten hexagonalen Gitterstruktur an (unten rechts).	120
Abbildung 4.44: Das 3D-Potenzialdiagramm zeigt den Anfangszustand mit einer stochastischer Ortsverteilung eines Vielteilchensystems.	121
Abbildung 4.45: Das 3D-Potenzialdiagramm zeigt den Endzustand mit einer stochastischer Ortsverteilung eines Vielteilchensystems. Durch die Fehlstelle im System ist deutlich eine Verzerrung im Gesamtpotenzial zu sehen.	121
Abbildung 4.46: Ein symmetrisches Teilchensystem links stellt einen labilen Ausgangszustand dar. Das System zieht sich leicht zusammen. Der Endzustand ist in der rechten Graphik abgebildet.	122
Abbildung 4.47: Oberste Reihe des symmetrischen Vielteilchensystem. Durch die Verzerrung der y-Achse ist die Schrumpfung deutlich zu erkennen.	123
Abbildung 4.48: Verlauf des maximalen Gradient über der Anzahl der Iterationsschritte mit logarithmischer y-Achse.	123

Abbildung 4.49: In dem dargestellten Konturdiagramm ist das Potenzialniveau der Teilchen zu sehen. Die linke Graphik zeigt den Anfangszustand, die rechte den Endzustand. Es ist sehr gut zu erkennen, dass sich die Teilchen ringförmig auf ein gleichmäßiges Potenzialniveau anordnen.	123
Abbildung 4.50: Von unten ist in dem 3D-Potenzialdiagramm der Verlauf des Potentials zwischen den Teilchen als dünne Stege zu erkennen.	124
Abbildung 4.51: 3D-Potenzialdiagramm von oben dargestellt. Die Teilchen befinden sich an den Orten der Potentialminima (dunkel blau).	125
Abbildung 4.52: 3D-Potenzialdiagramm von unten gesehen.	125
Abbildung 4.53: Ein labiles System (links) wird durch die Verschiebung eines Teilchens gestört. Den stabilen Endzustand des Systems zeigt die linke Graphik.	126
Abbildung 4.54: Verlauf des maximalen Gradient über der Anzahl der Iterationsschritte mit logarithmischer y-Achse.	126
Abbildung 4.55: 3D-Potenzialdiagramm des stabilen Endzustands.	127
Abbildung 4.56: Startzustand links und Endzustand rechts eines symmetrischen Vielteilchensystems. Die rechte und linke senkrechte Teilchenreihe sind in x - und y -Richtung fixiert.	128
Abbildung 4.57: 3D-Potenzialdiagramm des Endzustands des symmetrischen Vielteilchensystems.	128
Abbildungen 4.58: Iterationsschritte eines Systems mit fixierten Teilchen und Teilchen die verschoben werden. Die rechte Reihe der Teilchen ist in x und y -Richtung fixiert. Die linke Reihe wird schrittweise nach links verschoben. Alle anderen Teilchen können sich frei in x - und y -Richtung verschieben.	129
Abbildung 4.59: 3D-Potenzialdiagramm des Endzustandes.	130
Abbildung 4.60: 2D-Konturdiagramm des Potentials im Endzustand.	130
Abbildung 4.61: Iterationsschritte eines Systems mit fixierten Teilchen und Teilchen, die verschoben werden. Die rechte Reihe der Teilchen ist in x - und y -Richtung fixiert. Die linke Reihe wird schrittweise nach rechts verschoben. Alle anderen Teilchen können sich frei in x - und y -Richtung verschieben. In den oberen beiden Bildern sind der Anfangszustand und der Zustand maximaler zulässiger Kraft dargestellt. Die Untere Graphik zeigt den Zustand nach dem das System kollabiert ist.	131
Abbildung 5.1: Beispiel eines Potentials, das räumlich drei Minima aufweist. Dies könnte als vereinfachtes Modell für orbitale Bindungsmechanismen zwischen Atomen verwendet werden.	134

7 Literaturverzeichnis

- [Bild1, 2015]** Bild1: Wikipedia [Online].- 27. 07 2015.
<https://de.wikipedia.org/wiki/Bodenart>.
- [Böge, 2014]** Böge, A., Böge, W.: Handbuch Maschinenbau: Grundlagen und Anwendungen der Maschinenbau-Technik [Buch]. Springer Verlag, 2014.
- [Bronstein,2012]** Bronstein, Semendjajew: Taschenbuch der Mathematik [Buch]. Frankfurt am Main: Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch GmbH, 2012.
- [Feynman,2001]** Feynman R., P., Leighton, Robert, B., Sands, Matthew: Vorlesung über Physik [Buch]. München: Oldenbourg Wissenschaftsverlag GmbH, 2001.
- [Föll, 2014]** Föll, H.: uni-kiel [Online]. 08. 10 2014, http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/mw1_ge/kap_5/backbone/r5_1_2.html.
- [Fuchs, 2015]** Fuchs, C.: Steinzeitwissen [Online]. 27. 07 2015, <http://www.steinzeitwissen.de/rohmaterial-der-steinzeit/bergkristall>.
- [Halliday, 2013]** Halliday, D., Resnick, R., Walker, J.: Physik Bachelor-Edition [Buch]. Weinheim: WILEY-VCH, 2013, 978-3-527-41181-8.
- [Hering,1989]** Hering, Martin, Stohrer: Physik für Ingenieure [Buch]. Düsseldorf: VDI-Verlag GmbH, 1989.
- [Jung, 1998]** Jung, A.: <http://www.tuhh.de/rzt/rzt/it/Studium/seminar-lorenz/> [Online]. 1998, 27. 07 2015.
- [Melcher, 2006]** Melcher, J., et al.: Bionische Aktuatoren für die Adaptronik [Bericht]. Bremen: Bionik-Innovations-Centrum B-I-C- Bremen, 2006. 978-3-00-022050-0.
- [Melcher, 2004]** Melcher, J., Junge, M., Breitbach, E.: Wettbewerb der Visionen: Selbstorganisierende Strukturen [Bericht] Braunschweig: Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR), 2004.
- [Rebhan, 2006]** Rebhan, E.: Theoretische Physik: Mechanik [Buch]. München, Elsevier GmbH, 2006.

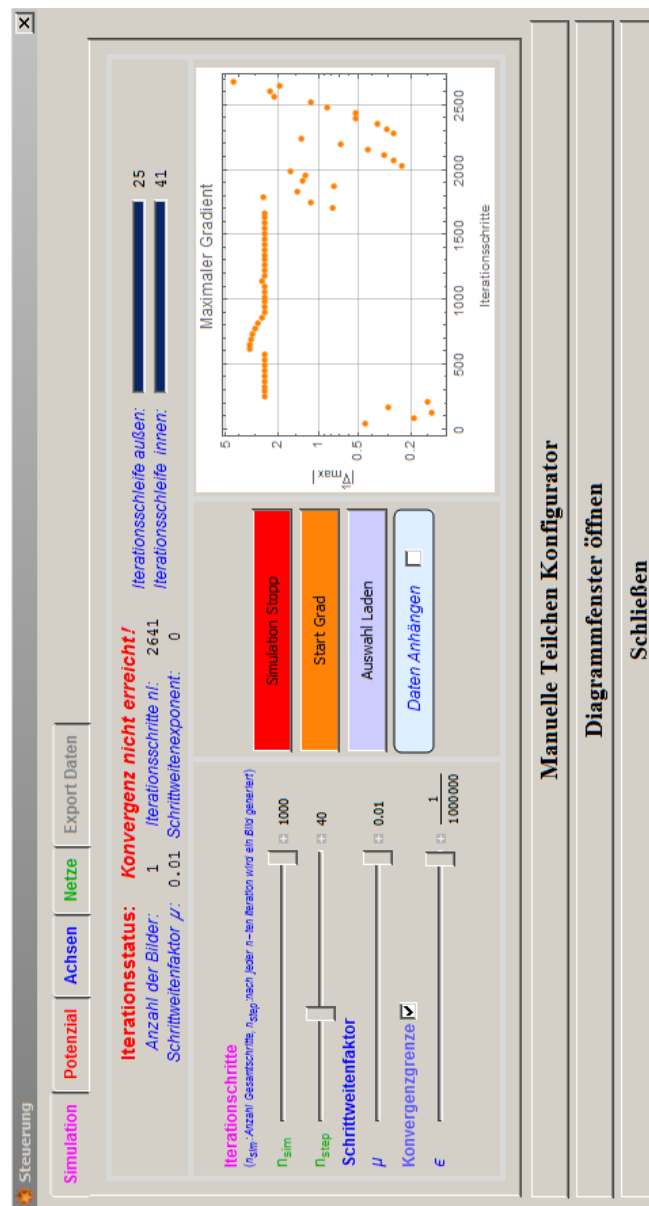
- [Redlich, 2011]** Redlich, J.: Auslegung und Berechnung von passiven Schwingungsisolationssystemen [Studienarbeit]. Braunschweig, DLR, 2011.
- [Schlichting, 1994]** Schlichting, H., J.: Prozess und Struktur [Bericht]. Universität GH Essen: Physik in der Schule, 1994, Physik in der Schule.
- [Schlichting, 2000/1]** Schlichting, H., J.: Von der Energieentwertung zur Entropie [Bericht]. WWU Münster: Praxis der Naturwissenschaften/Physik 49/2 7-11, 2000.
- [Schlichting, 2000/2]** Schlichting, H., J.: Von der Dissipation zur Dissipativen Struktur [Bericht]. WWU Münster: Praxis der Naturwissenschaften, 2000, Physik 49/2 (2000);12-6.
- [Stöcker, 2010]** Stöcker: Taschenbuch der Physik [Buchabschnitt]. Taschenbuch der Physik, Main: Harri Deutsch, 2010.
- [Tullius, 2015]** Tullius, M.: Konvektionszellen in Silikonöl [Online]. 20.04.2015: <http://www.kgroesner.de/>.
- [Weissmantel, 1995]** Weissmantel, C., Hamann, C.: Grundlagen der Festkörperphysik [Buch]. Heidelberg: Johann Ambrosius Barth Verlag Hütting GmbH, 1995.

8 Anhang

A. Programmoberfläche

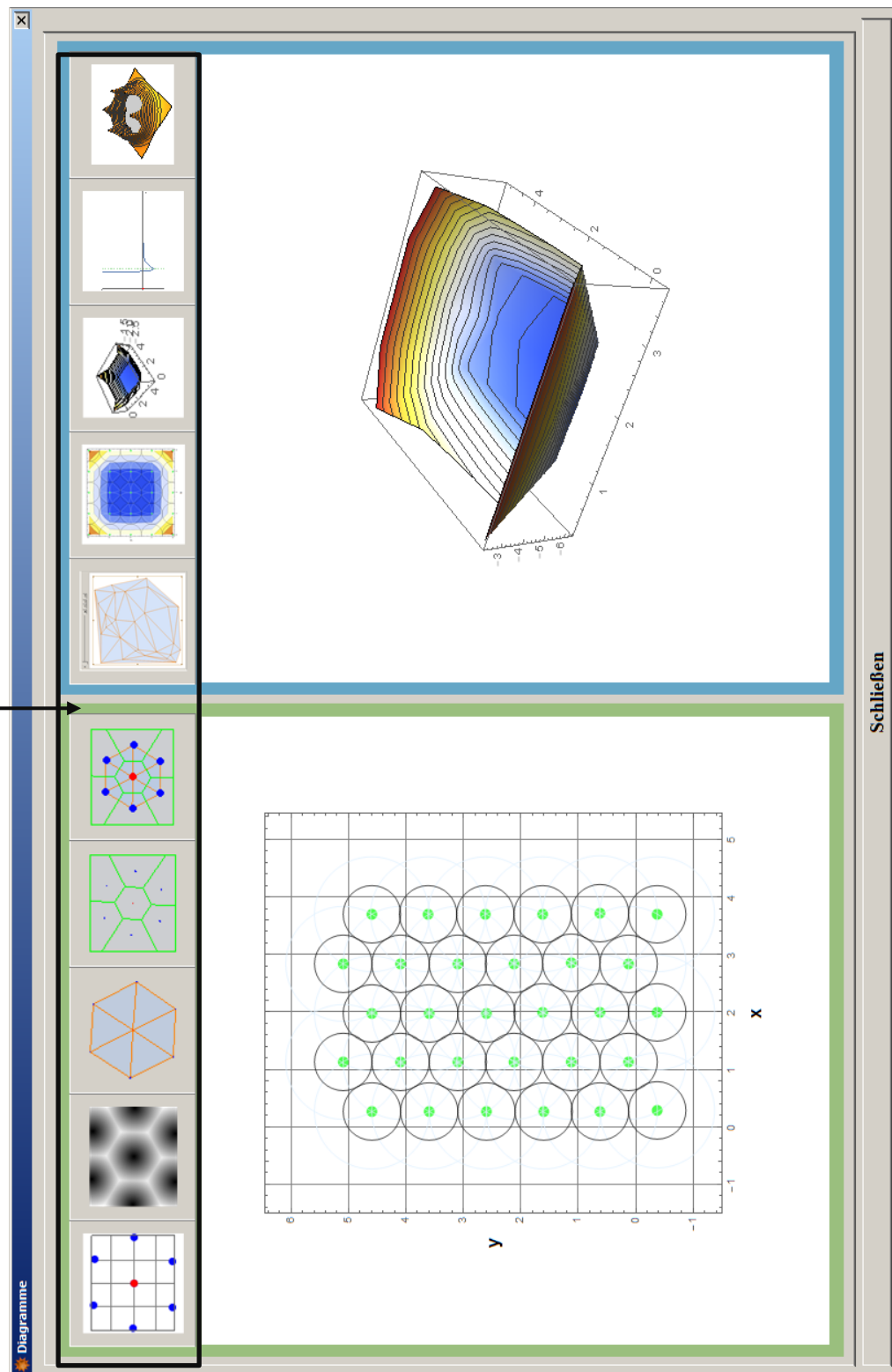
Steuerungsfenster

Beim Start des Programms „Potenzialbasierte Modellierung Selbstorganisierter Prozesse“ öffnet sich zunächst das Steuerungsfenster. Hier können alle relevanten Parameter eingestellt und die Simulation gesteuert werden. Durch Betätigung des Feldes „Diagrammfenster öffnen“ wird ein weiteres Fenster geöffnet, in dem die Diagramme dargestellt sind.

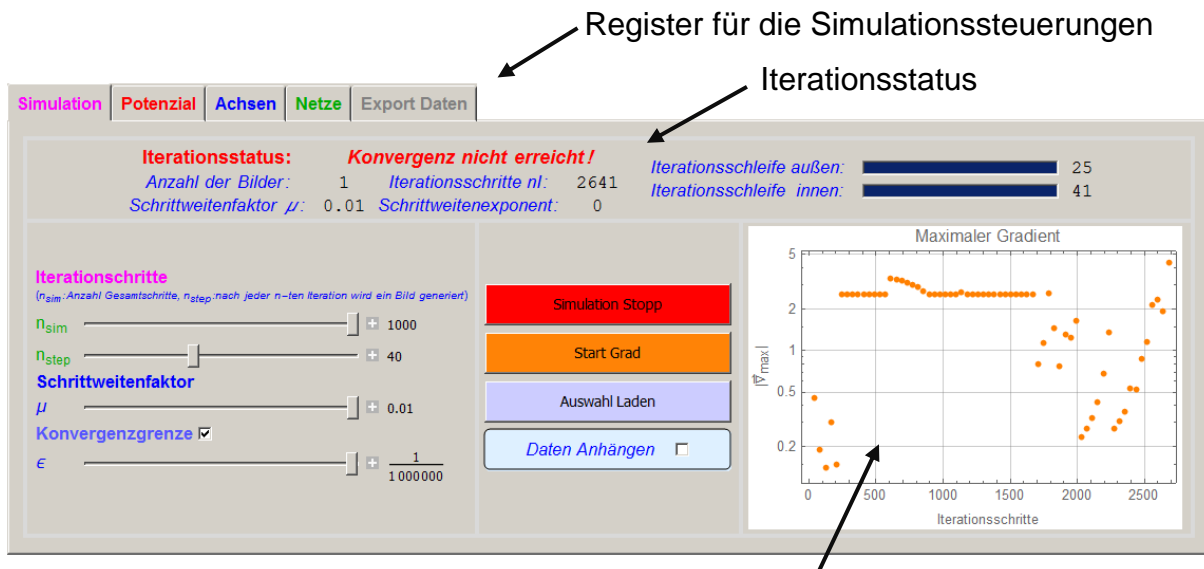


Diagrammfenster

Auswahl der Diagramme.



Einstellung der Simulation



Online-Anzeige des maximalen Gradienten

Simulationsparameter:

n_{sim} : Vorgabe der Iterationsschritte.

n_{sim} : Vorgabe nach wie vielen Iterationen die Simulationsdaten gespeichert werden sollen.

μ : Schrittweitenfaktor.

ϵ : Stoppt die Simulation beim Erreichen der Konvergenzgrenze.

Simulationssteuerung

Simulation Stopp: Stoppt den Iterationsprozess

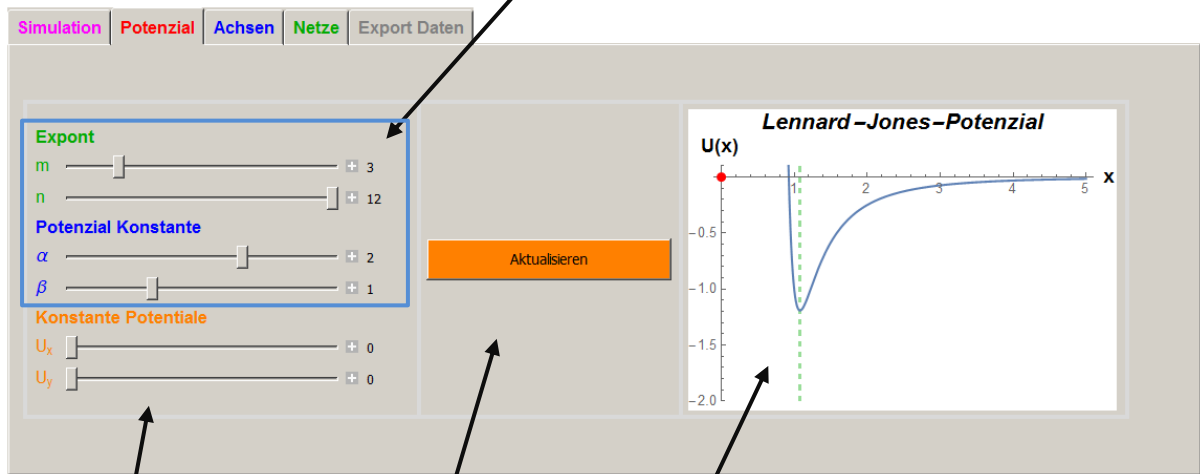
Start Grad: Starte den Iterationsprozess

Auswahl laden: Der im Animationsfenster ausgewählte Zustand des Systems wird in den Speicher geladen. Ein erneuter Iterationsvorgang startet dann von diesem Ausgangszustand.

Daten anhängen: Die Simulationsdaten werden bei einem erneuten Iterationsdurchlauf an die bereits bestehenden Daten angehängt.

Einstellung der Potenziale

Parameter des Lennard-Jones-Potenzials.

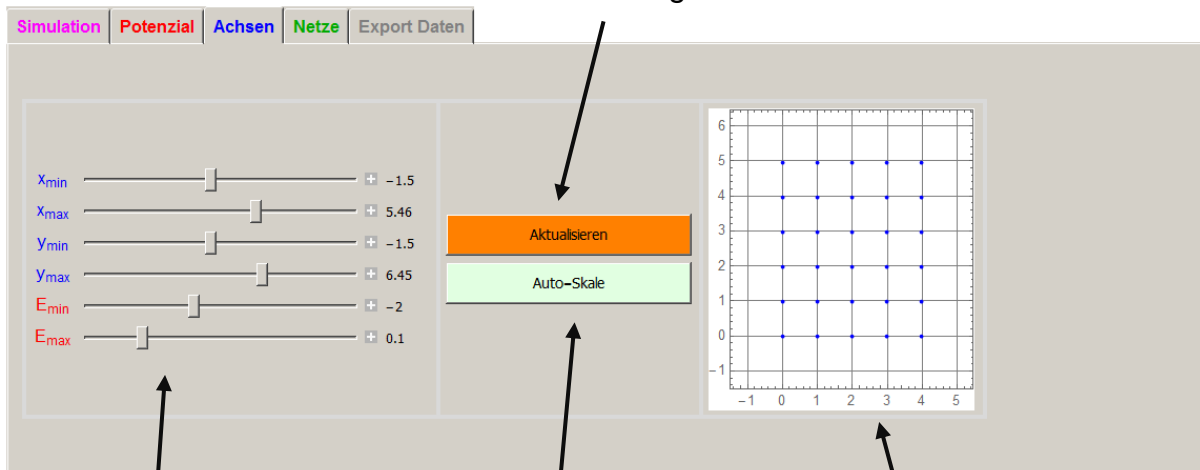


Anzeige des eingestellten Lennard-Jones-Potenzials.

Einstellungen übernehmen.

Parameter für konstante Potenziale in x - und/oder y -Richtung (z.B. Gravitation).

Einstellungen übernehmen.

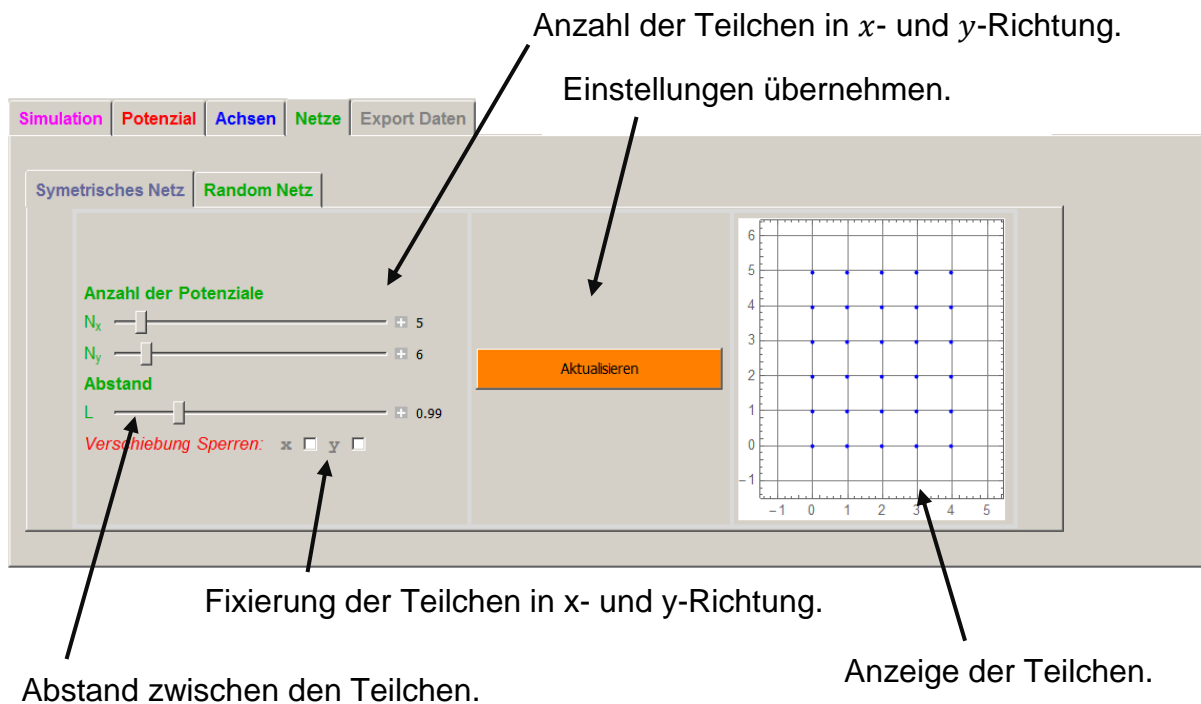


Automatische Achsenskalierung
anhand der Teilchenpositionen.

Anzeige des eigenstellten
Darstellungsbereichs.

Einstellung des Darstellungsbereichs.

Generator der Teilchenorte



Import und Export der Diagrammen und Daten

